UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Instituto de Física

Fenômenos de Transporte em Sistemas Fora do Equilíbrio

Pedro Henrique Guimarães dos Santos

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira

Coorientador: Prof. Dr. Gabriel T. Landi

Tese de doutorado apresentada ao Instituto de Física para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Mário José de Oliveira (IFUSP)

Prof. Dr. André de Pinho Vieira (IFUSP)

Prof. Dr. Luis Gregório Dias da Silva (IFUSP)

Prof. Dr. Roberto Menezes Serra (UFABC)

Prof. Dr. Emmanuel Araújo Pereira (UFMG)

São Paulo

2017

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Santos, Pedro Henrique Guimarães dos

Fenômenos de Transporte em Sistemas Fora do Equilíbrio.
São Paulo, 2017.

Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Depto. de Física Geral

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira
Coorientador: Prof. Dr. Gabriel T. Landi
Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Unitermos: 1. Mecânica estatística; 2. Condução de calor;
3. Dinâmica estocástica.

USP/IF/SBI-059/2017

Ao meu querido e muito amado sobrinho, Pedro Lucas.

“O valor de praticar com rigor, por algum tempo, uma *ciência rigorosa* não está propriamente em seus resultados: pois eles sempre serão uma gota ínfima, ante o mar das coisas dignas de saber. Mas isso produz um aumento de energia, de capacidade dedutiva, de tenacidade; aprende-se a *alcançar um fim de modo pertinente*. Neste sentido é valioso, em vista de tudo o que se fará depois, ter sido um homem de ciência.”

NIETZSCHE (1878)

Agradecimentos

Agradeço primeiramente ao meu orientador, Prof. Dr. Mário José de Oliveira, pela importante oportunidade concedida a mim de me tornar um de seus estudantes de doutorado. Agradeço pela disposição, pela paciência e, principalmente, pelo aprendizado constante durante todo o período em que este trabalho foi realizado e que ajudou a me tornar um melhor pesquisador e ser humano. Agradeço imensamente também ao meu coorientador, Prof. Dr. Gabriel T. Landi, com quem tive a oportunidade de compartilhar experiências acadêmicas inéditas, sem as quais este trabalho não seria possível. Agradeço por todos os conselhos, discussões e sugestões que permitiram que esse trabalho fosse concluído com sucesso.

Agradeço imensuravelmente aos meus pais, Carmem e Raimundo, e à minha irmã, Suelem, pelo apoio incondicional e constante durante toda essa longa jornada. Todas as dificuldades e percalços que enfrentei para chegar até aqui só puderam ser superados graças ao seu apoio, motivação, incentivo e fé. Serei eternamente grato a eles por tudo o que conquistei até aqui e por quem sou hoje.

Gostaria de agradecer aos meus muitos amigos que me acompanharam durante esses quatro anos e que sempre me apoiaram e me incentivaram a prosseguir, especialmente nos momentos de dificuldade. Não ousou mencionar todos os nomes aqui para não cometer a injustiça de esquecer alguém, mas faço questão de deixar registrado, em particular, um deles: meu grande amigo (de longa data), Dr. Carlos Eduardo Bistafa, que mesmo distante, não apenas compartilhou comigo importantes momentos do meu doutorado, como contribuiu diretamente nesta tese através de sugestões e correções gerais do texto. E não menos importante, agradeço também à Vanessa Cristhina Garavelo por sempre me apoiar, me incentivar e, sobretudo, acreditar em mim em todos os momentos até aqui.

Finalmente, agradeço ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo por tornar à disposição toda a sua infraestrutura e ao CNPq pelo suporte financeiro, que me permitiram realizar e concluir este trabalho.

A todos o meu muitíssimo e sincero obrigado!

Resumo

Fenômenos de transporte constituem um dos grandes desafios teóricos da mecânica estatística fora do equilíbrio, uma vez que a compreensão dos mecanismos microscópicos que regem tais fenômenos não está completamente estabelecida. Conduzidos, portanto, pela motivação de melhor compreender esses mecanismos, propomos nesta tese o estudo dos fenômenos de transporte através de dois modelos microscópicos em dois contextos distintos: clássico e quântico. No contexto clássico, consideramos como modelo uma cadeia de osciladores harmônicos acoplados, sujeita a um potencial local (*pinning*) anarmônico quártico (conhecido como modelo ϕ^4). A cadeia está em contato, através de suas extremidades, com dois reservatórios térmicos mantidos a temperaturas distintas, e sua dinâmica é dada por um sistema de equações de Langevin. Além disso, consideramos a inclusão de um ruído conservativo que inverte aleatoriamente o sentido da velocidade de cada partícula. Nesse sistema, estudamos dois fenômenos de transporte associados à condução de calor: a Lei de Fourier e a retificação térmica. Os resultados foram obtidos numericamente através da simulação do sistema usando-se métodos de dinâmica estocástica. A partir desses resultados pudemos concluir que, tanto a validade da Lei de Fourier, quanto a presença de uma retificação finita no limite termodinâmico, estão associadas à presença do ruído conservativo na dinâmica do sistema. No contexto quântico, utilizamos como modelo de trabalho uma cadeia de *spins* do tipo XX posta em contato, através de suas extremidades, com dois reservatórios mantidos a diferentes temperaturas e potenciais químicos. A interação com os reservatórios foi feita através de dissipadores de Lindblad presentes na equação mestra quântica que fornece a dinâmica do sistema. Esses dissipadores são acoplados aos modos normais do hamiltoniano do modelo de forma que, no equilíbrio, o sistema termaliza corretamente para o estado de Gibbs. Além de resultados numéricos, obtivemos através de um método perturbativo, expressões analíticas para os fluxos de energia e de partículas ao longo da cadeia, verificando que ambos possuem a estrutura da fórmula de Landauer. No regime em que o acoplamento com os reservatórios é fraco, verificamos ainda que as relações de reciprocidade de Onsager entre esses fluxos são satisfeitas.

Palavras-chave: Lei de Fourier, retificação térmica, ruído conservativo, modelo ϕ^4 , cadeia de *spins* do tipo XX , dissipadores de Lindblad

Abstract

Transport phenomena are one of the great theoretical challenges of out-of-equilibrium statistical mechanics since the understanding of the microscopic mechanisms governing such phenomena is not yet fully established. To better understand these mechanisms, we propose in this thesis the study of transport phenomena through two microscopic models in two distinct contexts: classical and quantum ones. In the classical context, we considered as a working model a chain of coupled harmonic oscillators, subject to a quartic anharmonic pinning (known as the ϕ^4 model). The chain is in contact, through its ends, with two thermal reservoirs kept at different temperatures, and its dynamics is given by a system of Langevin equations. In addition, we considered the inclusion of a conservative noise that randomly reverses the direction of the velocity of each particle. In this system, we studied two transport phenomena associated with heat conduction: the Fourier Law and the thermal rectification. The results were obtained numerically by simulating the system using stochastic dynamics methods. From these results we concluded that both the validity of the Fourier Law and the presence of a finite rectification in the thermodynamic limit are associated with the presence of the conservative noise in the system dynamics. In the quantum context, we used as a working model the XX spin chain that was put in contact, through its ends, with two reservoirs kept at different temperatures and chemical potentials. The interaction with the reservoirs was modeled through Lindblad dissipators included in the quantum master equation that describes the system dynamics. These dissipators are coupled to the normal modes of the model Hamiltonian so that, in equilibrium, the system thermalizes correctly to the Gibbs state. In addition to numerical results, we obtained through a perturbative method, analytical expressions for the energy and particle fluxes along the chain, verifying that both have the structure of the Landauer formula. In the regime where the coupling with the reservoirs is weak, we also verified that the Onsager reciprocal relations between these fluxes are satisfied.

Keywords: Fourier Law, thermal rectification, conservative noise, ϕ^4 model, XX spin chain, Lindblad dissipators.

Lista de Figuras

2.1	Perfil de temperatura da cadeia harmônica	9
2.2	Diodo Térmico	11
3.1	Esquema pictórico do modelo microscópico clássico	16
4.1	Processo de Poisson	27
5.1	Perfil de temperatura	34
5.2	Fluxo de calor em função do comprimento da cadeia ($g_L = 0$)	35
5.3	Fluxo de calor em função do ruído conservativo	36
5.4	Fluxo de calor em função da temperatura	37
5.5	Coeficiente de retificação em função do comprimento da cadeia ($g_L = 0$)	38
5.6	Coeficiente de retificação em função do ruído conservativo	38
5.7	Fluxo de calor e coeficiente de retificação em função do comprimento da cadeia ($g_L = 1$)	39
6.1	Reservatórios de múltiplos sítios	45
7.1	Relação de dispersão ϵ_k em função de k	57
7.2	Magnetização e susceptibilidade magnética da cadeia XX	59
8.1	Probabilidades de ocupação dos estados fundamental $ -\rangle$ e excitado $ +\rangle$ do sistema de dois níveis	66
8.2	Distribuição das probabilidades de ocupação P_n dos níveis do oscilador harmônico	70
9.1	Matrizes de covariância para uma cadeia em equilíbrio	92
9.2	Número de ocupação $\bar{n}_{b,k}$ em função de k	93
9.3	Valor absoluto das correlações ϑ e θ	94
9.4	Matriz de covariância para o sistema fora do equilíbrio	94

Lista de Figuras

9.5	Elementos da matriz de covariância em função de g	95
9.6	Número de ocupação do segmento B da cadeia	104
9.7	Fluxo de partículas como função da diferença de potencial químico	110
9.8	$\partial F / \partial \mu$ vs μ	112
9.9	$\partial F / \partial T$ vs μ	113
9.10	Influência de γ no fluxo de partículas	114
9.11	Fluxo de partículas para diferentes valores de L_b	116
9.12	Fluxo de partículas para diferentes valores de γ	118
9.13	$\partial G / \partial \mu$ vs μ	121
9.14	$\partial G / \partial T$ vs μ	122
9.15	Influência de γ no fluxo de energia	124
9.16	Coefficientes de Onsager	126
9.17	Coefficientes de Onsager cruzados	127
10.1	Modelo generalizado de Rabi	131

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Visão Geral do Trabalho	2
I	Sistema Clássico	5
2	Fenômenos de Transporte: Condução de Calor	7
2.1	Lei de Fourier	7
2.2	Retificação Térmica	11
3	Definições Gerais	15
3.1	Sistema	15
3.2	Reservatórios Térmicos e a Dinâmica de Langevin	17
3.3	Temperatura	20
3.4	Fluxo de Calor	21
3.5	Coeficiente de Retificação	23
4	Modelo Microscópico	25
4.1	O Ruído de Inversão de Velocidade	26
4.2	Simulações Numéricas	29
5	Resultados e Análises	33
5.1	Lei de Fourier	34
5.2	Retificação Térmica	36
5.3	Discussão e Conclusões	39

II Sistema Quântico	41
6 Fenômenos de Transporte em Sistemas Quânticos	43
7 A Cadeia XX	49
7.1 Diagonalização Exata	50
7.2 Transição de Fase Quântica	56
8 Dinâmica de Lindblad	61
8.1 Dinâmica Dissipativa	61
8.1.1 Sistema de Dois Níveis	63
8.1.2 Oscilador Harmônico Quântico	68
8.1.3 Férmion Livre	74
8.2 Dinâmica de Lindblad para Múltiplos Sítios	77
9 Resultados e Análises	83
9.1 Equação de Lyapunov	83
9.2 Solução Numérica	91
9.3 Solução Perturbativa	96
9.4 Fluxo de Partículas	107
9.4.1 Fluxo para $L_b = 0$	108
9.4.2 Fluxo para $L_b \neq 0$	115
9.5 Fluxo de Calor & Coeficientes de Onsager	118
9.5.1 Fluxo de Energia para $L_b = 0$	120
9.5.2 Coeficientes de Onsager	124
9.6 Discussão e Conclusões	127
10 Considerações Finais & Perspectivas	129
Bibliografia	133
A Evolução Temporal de $\langle \mathcal{H} \rangle$	141
B Código Fonte: Sistemas Clássicos	145
C Publicações	151

Capítulo 1

Introdução

A Mecânica Estatística conecta os mundos micro e macroscópico. Seu desenvolvimento foi motivado, em grande parte, pela necessidade de um maior entendimento dos fenômenos (macroscópicos) descritos pela Termodinâmica a nível atômico e molecular, a partir das leis da Mecânica Clássica e da Mecânica Quântica.

Podemos dividir a Mecânica Estatística em duas partes: equilíbrio e não-equilíbrio (ou fora do equilíbrio). A primeira está bem desenvolvida e fundamentada. Através do formalismo de Gibbs é possível obtermos todas as propriedades macroscópicas de um sistema em equilíbrio termodinâmico conhecendo-se apenas seu hamiltoniano.

Quanto aos sistemas fora do equilíbrio, não há uma formulação análoga à de Gibbs para descrever tais sistemas, mesmo quando estes se encontram em um estado estacionário. Existem hoje diversas abordagens propostas na tentativa de se estudar, microscopicamente, sistemas fora do equilíbrio. Em sistemas clássicos, por exemplo, temos a equação de transporte de Boltzmann [1], métodos estocásticos descritos pela equação de Langevin [2, 3] (ou, equivalentemente, pela equação de Fokker-Planck), onde a correlação ou interação entre o sistema e o reservatório é considerada como uma variável contínua aleatória, equações mestras [2], etc. Já em sistemas quânticos, são frequentes as abordagens baseadas nas técnicas provenientes da teoria de sistemas quânticos abertos [4–8], tais como a equação de Langevin quântica ou a equação mestra quântica. Há também uma abordagem mais recente proposta por de Oliveira que consiste em uma versão quântica da equação de Fokker-Planck [9].

Uma classe de fenômenos particularmente interessante em sistemas fora do equilíbrio é a de *fenômenos de transporte*. Estes fenômenos são caracterizados pelo aparecimento de fluxos quando o sistema em questão está sujeito às chamadas *forças termodinâmicas*, expressas usualmente na forma de gradientes de campos termodinâmicos, como pressão, temperatura e

Capítulo 1. Introdução

potencial químico. As forças e seus respectivos fluxos estão associados por *leis fenomenológicas*¹ e são descritos por suas respectivas equações constitutivas. A equação constitutiva para essas leis assume uma forma bastante geral:

$$\mathcal{J} = -\sigma \nabla \phi, \quad (1.1)$$

onde $\mathcal{J}$ representa o fluxo, ϕ o respectivo campo termodinâmico e a constante de proporcionalidade σ é o chamado *coeficiente de transporte*, que depende das características do material que compõe o sistema. Há ainda fluxos devidos à efeitos cruzados, tais como o surgimento de corrente elétrica causado por um gradiente de temperatura e vice-versa (efeito termoelétrico) [12], por exemplo. A relação entre fluxos e forças termodinâmicas foi estudada por Onsager [13], que estabeleceu relações gerais entre pares de forças termodinâmicas e fluxos para os mais diversos tipos de sistemas. Tais relações são denominadas *relações de reciprocidade de Onsager* e sua importante descoberta o laureou, em 1968, com o prêmio Nobel de Química.

Microscopicamente, a descrição e caracterização dos fenômenos de transporte é bastante complexa. A falta de um formalismo poderoso como o de Gibbs, conforme já mencionado, nos impede de estudar sistemas em sua generalidade e nos impele ao estudo de modelos mais simples a partir de suas dinâmicas, utilizando abordagens como as descritas anteriormente.

Motivados por este cenário, propomos no presente trabalho o estudo dos fenômenos de transporte em dois diferentes contextos: clássico e quântico. No contexto clássico, estamos interessados em estudar microscopicamente os fenômenos de transporte associados à condução de calor, em particular, a Lei de Fourier de condução de calor e a retificação térmica, através de modelos unidimensionais baseados em cadeias de osciladores harmônicos e anarmônicos. No contexto quântico, utilizamos cadeias de *spins* para estudarmos, além do transporte de calor, o transporte de magnetização, bem como verificar a relação entre eles.

A seguir, fornecemos uma visão geral deste trabalho, apresentando brevemente o seu conteúdo.

1.1 Visão Geral do Trabalho

Esta tese está dividida em duas partes distintas, sendo cada uma delas referente a um dos contextos (clássico e quântico) estudados.

A **Parte I** refere-se ao sistema clássico e compreende os capítulos 2 ao 5. No **Capítulo 2**

¹A saber, temos o transporte de momento, associado ao gradiente de pressão pela *Lei de Newton* (para fluidos); o transporte de calor, associado ao gradiente de temperatura pela *Lei de Fourier* [10] e o transporte de partículas, associado ao gradiente de potencial químico pela *Lei de Fick* [11]. Há também o transporte de elétrons em um condutor, associado ao gradiente de potencial eletrostático pela *Lei de Ohm*.

1.1. Visão Geral do Trabalho

apresentamos de maneira detalhada a Lei de Fourier e o fenômeno da retificação térmica. Além da descrição matemática, fazemos uma breve análise bibliográfica dos trabalhos mais relevantes sobre cada um destes assuntos. No **Capítulo 3** fazemos considerações gerais sobre os tipos de sistemas que estamos utilizando e fornecemos uma descrição matemática mais precisa da dinâmica destes sistemas, bem como de todas as grandezas relevantes para o trabalho. No **Capítulo 4** introduzimos o modelo microscópico proposto para o estudo da Lei de Fourier e da retificação térmica e descrevemos o ruído conservativo de inversão de velocidades. Apresentamos também o algoritmo estocástico usado para simular a dinâmica do sistema. Já no **Capítulo 5**, analisamos os resultados obtidos e, por fim, concluímos a parte clássica do trabalho, delineando seus principais aspectos.

A **Parte II** diz respeito ao sistema quântico e compreende os capítulos 6 ao 9. No **Capítulo 6** fazemos uma breve introdução sobre fenômenos de transporte em sistemas quânticos, apresentando algumas das principais abordagens utilizadas para se estudar tais fenômenos. Também fazemos uma recapitulação dos trabalhos relevantes presentes na literatura acerca do tema e apresentamos a proposta do presente trabalho. O **Capítulo 7** é dedicado à descrição detalhada do modelo utilizado neste trabalho, uma cadeia de *spins* do tipo XX . Introduzimos seu hamiltoniano característico e fazemos a formulação alternativa em torno de operadores fermiônicos através da transformação de Jordan-Wigner. Fazemos a diagonalização exata do modelo e apresentamos suas propriedades termodinâmicas à temperatura zero, incluindo a transição de fase quântica. No **Capítulo 8** discorremos sobre a dinâmica de Lindblad, que nos fornece a interação do sistema com os reservatórios. Apresentamos algumas propriedades gerais sobre dissipadores de Lindblad e mostramos alguns exemplos de dissipadores para alguns sistemas simples. Introduzimos, matematicamente, a proposta dos reservatórios de Lindblad atuando em múltiplos sítios e construímos a equação mestra quântica que utilizaremos ao longo desta tese. No **Capítulo 9** apresentamos e analisamos todos os resultados obtidos e concluímos a parte quântica do trabalho, discutindo suas principais características.

Finalmente, no **Capítulo 10**, falamos brevemente sobre outros trabalhos realizados durante o doutorado do aluno, delineamos em linhas gerais algumas considerações em relação à tese e falamos sobre as perspectivas futuras do projeto e possíveis continuidades.

Parte I

Sistema Clássico

A primeira parte desta tese é dedicada à abordagem clássica do problema da condução de calor. Mais precisamente, na Lei de Fourier e no fenômeno da retificação térmica. Nos capítulos a seguir, apresentaremos brevemente esses dois fenômenos associados à condução de calor e faremos uma breve revisão bibliográfica acerca desses temas. Introduziremos o sistema microscópico utilizado neste trabalho, fazendo sua descrição hamiltoniana detalhadamente. Descreveremos também a interação deste sistema com os reservatórios térmicos, modelados através de ruídos estocásticos, cuja dinâmica é dada pela equação de Langevin. Além dos reservatórios térmicos, incluiremos o ruído aleatório de inversão de velocidades que, como veremos, possui fundamental relevância para a verificação de ambos, a Lei de Fourier e a retificação térmica, no modelo proposto. Por fim, apresentaremos e analisaremos os resultados obtidos através de simulações de dinâmica estocástica. Tais resultados foram publicados na revista *Physical Review E*, conforme a referência [14]. Uma cópia deste artigo está disponível no [Apêndice C](#).

Capítulo 2

Fenômenos de Transporte: Condução de Calor

Apresentamos neste capítulo uma descrição dos fenômenos relacionados ao transporte de calor em sistemas clássicos, expondo de forma sucinta suas características mais essenciais. Fazemos também uma breve recapitulação de alguns dos trabalhos mais relevantes presentes na literatura.

2.1 Lei de Fourier

Há cerca de 200 anos, Fourier propôs a lei de condução de calor em sistemas macroscópicos que hoje leva seu nome [10]. Essa lei afirma que, quando um sistema é submetido a uma diferença de temperatura, o fluxo de calor $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ no ponto espacial $\mathbf{r}$ do sistema e no instante t é proporcional ao gradiente de temperatura $T(\mathbf{r}, t)$:

$$\mathbf{J} = -\kappa \nabla T, \quad (2.1)$$

onde $\kappa(\mathbf{r}, T)$ é a condutividade térmica do sistema. Se $u(\mathbf{r}, t)$ representa a densidade de energia, então a equação de continuidade

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (2.2)$$

deve ser satisfeita. Usando a relação $\partial u / \partial T = c$, sendo c o calor específico por unidade de volume e substituindo a equação (2.1) na equação de continuidade, obtemos a equação de *difusão* do calor:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{c} \nabla \cdot (\kappa \nabla T). \quad (2.3)$$

Capítulo 2. Fenômenos de Transporte: Condução de Calor

Para κ constante, a equação acima se torna

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \nabla^2 T, \quad (2.4)$$

onde $D = \kappa/c$ é o coeficiente de difusão. Assim, a lei de Fourier descreve a transmissão *difusiva* de energia, que microscopicamente pode ser compreendida como o movimento dos portadores dessa energia, como por exemplo moléculas, elétrons, vibrações da rede (fônons), átomos de um gás, etc., que sofrem *colisões aleatórias* movendo-se, então, difusivamente.

A compreensão de como a energia é transportada em um determinado sistema possui um grande interesse acadêmico e tecnológico [15], sendo a lei de Fourier a base conceitual do problema de transporte de energia. Entretanto, apesar de sua indubitável validade empírica, não existe uma demonstração geral dessa lei com base em uma descrição microscópica desses sistemas, tampouco critérios e condições para sua validade em casos gerais. E este básico (porém não trivial) problema motivou e motiva um grande número de estudos e trabalhos visando modelos microscópicos para a condução de calor [16].

O modelo microscópico mais simples que podemos considerar consiste em uma cadeia (unidimensional) de L partículas de massas unitárias que interagem entre si harmonicamente (interação de primeiros vizinhos). Este modelo pode ser descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{\text{harm}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L v_i^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{L-1} (x_i - x_{i+1})^2, \quad (2.5)$$

sendo v_i e x_i a velocidade e a posição da i -ésima partícula, respectivamente, e k a constante de interação. A primeira e última partículas estão em contato com reservatórios térmicos mantidos a temperaturas T_A e T_B distintas. Utilizando-se métodos de dinâmica estocástica (como a equação de Langevin, já mencionada anteriormente) para resolver as equações de movimento deste sistema, é possível obter, no estado estacionário, o fluxo de calor J e assim verificar sua dependência com o gradiente de temperatura ∇T . No caso de um sistema unidimensional finito, esse gradiente pode ser aproximado como a razão entre a diferença das temperaturas dos reservatórios (ΔT) e o tamanho da cadeia (L), de forma que:

$$J \propto \frac{\Delta T}{L}, \quad (2.6)$$

sendo a constante de proporcionalidade a condutividade térmica, conforme a equação (2.1). Em outras palavras, um modelo microscópico para a lei de Fourier deve prever que o fluxo de calor J decaia, para ΔT fixo, com o tamanho L da cadeia.

Este modelo foi resolvido analiticamente por Rieder *et al.* [17] em 1967, mas o resultado

2.1. Lei de Fourier

obtido foi um fluxo de calor constante, ou seja, que não depende do tamanho da cadeia:

$$J = \frac{k}{2\alpha} k_B \Delta T \left[1 + \frac{\nu}{2} - \frac{\nu}{2} \sqrt{1 + \frac{4}{\nu}} \right], \quad \nu = \frac{k}{\alpha^2}, \quad (2.7)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, e α é o acoplamento entre as partículas das extremidades e os respectivos reservatórios térmicos. Dizemos então, neste caso, que o transporte de calor se dá balisticamente. Em termos da condutividade térmica, é equivalente a dizer que ela escala com o tamanho do sistema ($\kappa \sim L$), de forma que no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$) ela diverge. Além disso, não há a formação de um gradiente de temperatura ao longo da cadeia, como é possível verificar na [Figura 2.1](#). Este resultado, apesar de não representar uma condução normal

Figura 2.1: Perfil de temperatura para uma cadeia harmônica composta por 50 partículas. As temperaturas dos reservatórios valem $T_A = 2$ (primeira partícula) e $T_B = 1$ (última partícula). A temperatura da i -ésima partícula é tal que $T_i \propto \langle v_i^2 \rangle$. Figura obtida a partir de resultado exato, conforme a referência [17].

de calor, é extremamente importante, pois mostra que a validade da lei de Fourier não é trivial, mesmo para o modelo mais simples.

Para evitar o fluxo balístico e torná-lo difusivo, podemos pensar na inclusão de um termo anarmônico no potencial de interação entre as partículas na cadeia harmônica:

$$\mathcal{H}_{\text{anarm}} = \sum_{i=1}^L \frac{1}{2} v_i^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{L-1} (x_i - x_{i+1})^2 + \frac{\beta}{4} \sum_{i=1}^{L-1} (x_i - x_{i+1})^4, \quad (2.8)$$

em que β é a constante de interação anarmônica. Este modelo foi estudado numericamente por Lepri *et al.* [18, 19], porém, um transporte anômalo foi obtido, com a condutividade térmica divergindo no limite termodinâmico aproximadamente com $\kappa \sim L^{1/2}$.

Além das interações anarmônicas entre as partículas, outras formas de anarmonicidade foram consideradas através da inclusão de potenciais locais (também chamados de potenciais *on site*, ou mais usualmente de *pinning*), como o modelo ϕ^4 , cujo hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}_{\phi^4} = \sum_{i=1}^L \frac{1}{2} v_i^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{L-1} (x_i - x_{i+1})^2 + \frac{q}{4} \sum_{i=1}^L x_i^4, \quad (2.9)$$

onde q é a intensidade do potencial local. Este modelo é assim chamado em analogia à teoria de campo escalar, e foi estudado por Aoki *et al.* [20]. Para este modelo, uma condutividade térmica independente do tamanho da cadeia foi obtida ($\kappa \sim L^0$) e consequentemente uma condução normal foi verificada, confirmando a validade da lei de Fourier.

Uma alternativa à inclusão de termos anarmônicos na cadeia harmônica, foi a introdução de ruídos estocásticos na dinâmica do sistema, que representariam a interação das partículas com graus de liberdade externos, não contemplados em seu hamiltoniano. É o caso, por exemplo, do modelo de um cristal harmônico com reservatórios estocásticos auto-consistentes, introduzido e estudado numericamente por Bolsterli *et al.* [21] em 1970, e resolvido analiticamente por Bonetto *et al.* [22] em 2004 e de forma independente por Pereira e Falcão [23] também em 2004. Neste modelo, além das partículas das extremidades da cadeia, as partículas no *bulk* também estão em contato com reservatórios estocásticos mantidos a certas temperaturas. Entretanto, essas temperaturas (no *bulk*) são escolhidas de forma auto-consistente, tal que no estado estacionário, em média, o fluxo de calor trocado é nulo. Em ambos os trabalhos foram obtidas condutividades térmicas finitas no limite termodinâmico ($\kappa \sim L^0$).

Mais recentemente, em 2011, Dhar *et al.* [24] introduziram um outro tipo de ruído estocástico nas partículas do *bulk*, diferente dos reservatórios auto-consistentes. Trata-se de um ruído que inverte aleatoriamente a velocidade das partículas com uma certa taxa λ . Vale ainda notar que este ruído é *conservativo*, uma vez que a energia cinética das partículas não é alterada com a inversão do sinal de suas velocidades. Eles aplicaram este ruído em uma cadeia harmônica com desordem (neste caso, partículas com massas aleatoriamente distribuídas em um certo intervalo) e obtiveram, para $\lambda > 0$, uma condutividade térmica finita no limite termodinâmico ($\kappa \sim L^0$). Já no limite em que $\lambda \rightarrow 0$, o resultado obtido foi uma condutividade térmica divergente com $\kappa \sim \lambda^{-1/2}$. Em 2013/2014, Landi e Oliveira [25, 26] aplicaram o mesmo ruído em cadeias harmônicas e anarmônicas ordenadas (massas iguais), obtendo no limite termodinâmico e para $\lambda > 0$, condutividades térmicas que escalam com $\kappa \sim L^0$ em ambos os casos. Para $\lambda \rightarrow 0$, a condutividade térmica obtida diverge com $\kappa \sim \lambda^{-1}$ para o caso harmônico e aproximadamente com $\kappa \sim \lambda^{-1/2}$ para o anarmônico. É importante mencionarmos que, apesar de dinâmicas bastante distintas, o ruído de inversão de velocidades e os reservatórios estocásticos auto-consistentes

2.2. Retificação Térmica

possuem estados estacionários bastante semelhantes, conforme provado por Lukkarinen [27]. Esta “equivalência” pode ser usada para se comparar as previsões teóricas de um com os resultados numéricos do outro, checando a consistência de ambos os modelos.

Além de interações anarmônicas e dos *bulk noises*, diversos outros modelos foram propostos e analisados, analítica e numericamente. Para uma revisão mais ampla sobre o tema, indicamos por exemplo, as referências [28–31].

Neste trabalho, seguiremos a linha proposta por Landi e Oliveira, onde vamos estudar a validade da lei de Fourier em outros modelos sujeitos ao ruído de inversão de velocidades.

2.2 Retificação Térmica

Como vimos há pouco, quando um sistema é posto em contato entre dois reservatórios térmicos mantidos a temperaturas distintas, um fluxo de calor surge do reservatório mais quente para o mais frio, sendo este fluxo proporcional ao gradiente de temperatura que se forma ao longo do sistema, conforme prevê a lei de Fourier.

Imaginemos agora que, dado o mesmo sistema, invertamos a posição dos reservatórios. Naturalmente esperamos (e de fato ocorre) que o fluxo de calor continue a surgir do reservatório mais quente para o mais frio, tendo apenas sua orientação invertida devido à troca das posições dos reservatórios. Neste momento, entretanto, uma observação não tão óbvia se faz: a *magnitude* do fluxo de calor também pode variar. E se assim o for, dizemos que o sistema apresenta *retificação térmica*. A Figura 2.2 ilustra a situação descrita.

Figura 2.2: Esquema ilustrativo do fenômeno da retificação térmica. Quando a posição dos reservatórios é trocada, o fluxo de calor (representado pela seta) se torna menor em valor absoluto. Sistemas que apresentam essa característica são chamados de “diodos térmicos”, em analogia aos diodos elétricos, que retificam a passagem de corrente elétrica.

Capítulo 2. Fenômenos de Transporte: Condução de Calor

Sucintamente, a retificação térmica é, portanto, um fenômeno no qual o transporte térmico ao longo de um eixo específico de um determinado sistema depende do sinal do fluxo de calor (ou equivalentemente, do gradiente de temperatura) ao longo desse eixo. Desde sua primeira observação experimental em 1936 por Starr [32] ao estudar o transporte de calor em uma junção de cobre metálico e óxido de cobre, a retificação térmica tem sido assunto de grande interesse acadêmico e tecnológico [33], tendo motivado o desenvolvimento de uma nova linha de pesquisa dedicada ao seu estudo: a fonônica [34].

Existem ao menos dois “ingredientes” fundamentais na composição de um sistema para garantir a existência de retificação térmica: o primeiro é uma assimetria intrínseca ao sistema para quebrar a invariância sob a inversão das posições dos reservatórios. O segundo é uma condutividade térmica dependente da temperatura, que está relacionada com o espectro de frequências dos fônons que se propagam pelo sistema. Entretanto, apesar de tais ingredientes serem necessários para se observar o efeito da retificação térmica, eles não são suficientes para garantir que o efeito persista no limite termodinâmico, conforme discutiremos mais adiante.

O primeiro modelo microscópico para se estudar a retificação térmica foi proposto em 2002 por Terraneo *et al.* [35]. Esse modelo consiste em uma cadeia harmônica sujeita a um *pinning* altamente anarmônico, representado pelo potencial de Morse [36]:

$$V(x_i) = D(e^{-\alpha x_i} - 1)^2, \quad (2.10)$$

onde D e α são constantes positivas. A cadeia foi dividida em três segmentos: dois deles (localizados nas extremidades) com parâmetros D e α iguais, diferindo dos parâmetros do segmento central da cadeia. O resultado obtido foi tal que o fluxo de calor varia por um fator 2 quando a posição dos reservatórios é invertida. Os autores concluem que o efeito é devido à separação entre o espectro de frequências dos fônons da região central da cadeia em relação às bandas dos segmentos das extremidades. Essa separação está diretamente associada à dependência da condutividade térmica do sistema com a temperatura, como havíamos mencionado.

Já em 2004, outro modelo baseado em potencial *on site* foi proposto por Li, Wang & Casati [37]. Neste modelo, uma cadeia harmônica submetida a um *pinning* anarmônico, dado pelo potencial de Frenkel-Kontorova (FK) [38]:

$$V(x_i) = -\frac{K}{(2\pi)^2} \cos(2\pi x_i), \quad (2.11)$$

é dividida em dois segmentos cujos parâmetros $K > 0$ do potencial FK são distintos em cada um deles. Diferente do modelo anterior, a eficiência da retificação neste caso foi de um fator

2.2. Retificação Térmica

da ordem de 100. E novamente a separação entre as bandas de frequências dos fônons dos dois segmentos é o mecanismo que está por trás da retificação. Frisamos que a não-linearidade da cadeia, introduzida pelo potencial anarmônico, é o fator responsável pela dependência do espectro de frequências dos fônons (e consequentemente, da condutividade térmica) com a temperatura. Já a diferença na eficiência da retificação entre esse modelo e o anterior é mais quantitativa do que qualitativa: depende essencialmente de uma escolha apropriada de parâmetros e da forma específica do potencial anarmônico.

O modelo de Li *et al.* inspirou mais alguns trabalhos de sua autoria baseados também no potencial *on site* FK [39–41]. Porém, análises mais cuidadosas feita por Hu *et al.* [42, 43] mostraram, dentre outras propriedades, que a retificação apresentada nos modelos até então propostos diminuem com o aumento do tamanho do sistema, desaparecendo efetivamente no limite termodinâmico. Este fato é contrário aos resultados experimentais, em que retificações não-nulas são verificadas [32, 44–47]. Algumas propostas foram feitas na tentativa de se obter uma retificação persistente com o aumento do tamanho do sistema, como a inclusão de interação de longo alcance entre as partículas do sistema, proposta por Pereira & Ávila [48], e o *design* de retificadores térmicos baseados em propriedades macroscópicas de materiais que formam sistemas microscópicos [42].

Neste sentido, nosso trabalho propõe a análise da retificação térmica em um modelo microscópico sujeito ao ruído de inversão de velocidades, na tentativa de mostrar que este novo “ingrediente” pode garantir uma retificação não-nula no limite termodinâmico.

Capítulo 3

Definições Gerais

No capítulo anterior, mencionamos ou fizemos uso dos conceitos de temperatura, fluxo de calor e retificação térmica de maneira “informal” enquanto descrevíamos os fenômenos associados à estas grandezas. Apresentamos também, de maneira bastante breve, alguns dos modelos presentes na literatura e seus hamiltonianos, porém sem fornecer detalhes em relação às suas dinâmicas. Entretanto, a fim de darmos prosseguimento à análise desses fenômenos, uma descrição matemática mais detalhada de tais grandezas se faz necessária, bem como a formulação estocástica das dinâmicas dos sistemas em questão.

Assim, apresentaremos a seguir as definições e conceitos matemáticos de temperatura, fluxo de calor e coeficiente de retificação utilizados neste trabalho. E para que essas definições possuam um caráter abrangente (dentro da classe de problemas que estamos estudando), consideraremos um sistema mais geral (em relação àqueles mencionados anteriormente no [Capítulo 2](#)), descrito também a seguir.

3.1 Sistema

Vamos considerar uma cadeia constituída por L partículas interagentes descrita pelo hamiltoniano geral

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^L \left[\frac{p_k^2}{2m_k} + V(x_k) \right] + \sum_{k=1}^{L-1} U(x_k - x_{k+1}). \quad (3.1)$$

Aqui, $p_k = m_k v_k$ corresponde ao momento da k -ésima partícula (com m_k sendo sua massa, e v_k sua velocidade) e x_k corresponde ao seu deslocamento em relação à sua posição de equilíbrio. $U(x_k - x_{k+1})$ corresponde à energia de interação entre as partículas vizinhas k e $k + 1$ e $V(x_k)$ é o potencial local (*pinning*) ao qual a partícula está sujeita. Consideremos ainda que as partículas das extremidades da cadeia ($k = 1$ e $k = L$) estão em contatos com reservatórios

Capítulo 3. Definições Gerais

térmicos mantidos a temperaturas distintas T_A e T_B . A representação deste sistema pode ser vista na [Figura 3.1](#).

Figura 3.1: Esquema pictórico do modelo microscópico clássico. L partículas de massa m_k acopladas entre si através da interação $U(x_k - x_{k+1})$ estão sujeitas a um potencial local $V(x_k)$ que representa a interação com um substrato externo. As partículas das extremidades estão sujeitas à interação com dois reservatórios térmicos mantidos a temperaturas T_A e T_B distintas.

A dinâmica do sistema é composta por duas partes: i) a dinâmica hamiltoniana, devida às interações U e V , e ii) a dinâmica estocástica, proveniente da interação entre as partículas (das extremidades) e os reservatórios térmicos.

Para as partículas do *bulk* ($2 \leq k \leq L-1$), as equações de movimento são dadas trivialmente pelas equações de Hamilton

$$\frac{dx_k}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k}, \quad (3.2a)$$

$$\frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_k}. \quad (3.2b)$$

Substituindo o hamiltoniano (3.1) nas equações anteriores, obtemos

$$\frac{dx_k}{dt} = v_k, \quad (3.3a)$$

$$\frac{dp_k}{dt} = F_k, \quad (3.3b)$$

sendo $F_k = -\partial \mathcal{H} / \partial x_k$, portanto, a força que atua sobre a k -ésima partícula. Já para as partículas das extremidades, além das forças provenientes dos potenciais U e V , suas equações de movimento envolvem também uma *força estocástica* proveniente do contato com o reservatório térmico. Para descrever tal força, é necessário utilizarmos o formalismo de *dinâmica estocástica*, o que faremos logo adiante.

3.2 Reservatórios Térmicos e a Dinâmica de Langevin

Uma das formas mais usuais de se modelar a interação de um reservatório térmico com uma partícula é através da *dinâmica de Langevin*. Inicialmente utilizada para descrever o movimento Browniano, a dinâmica de Langevin propõe que uma partícula que interage com o meio (ou equivalentemente com um reservatório térmico) está sujeita a duas forças distintas. Uma força dissipativa, que atua na forma de um atrito viscoso proporcional à sua velocidade, e uma força de caráter aleatório, relacionada às flutuações térmicas provenientes do reservatório. Em particular, a equação de Langevin para uma partícula de massa m que realiza um movimento unidimensional é dada por

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F_a(t), \quad (3.4)$$

tal que

$$v = \frac{dx}{dt} \quad (3.5)$$

corresponde à sua velocidade e x à sua posição no instante t . O termo $-\alpha v$ no lado direito da equação (3.4) corresponde ao atrito viscoso, sendo α o coeficiente de atrito e o termo $F_a(t)$ é a força aleatória. Tal força é caracterizada pelas seguintes propriedades:

1. $F_a(t)$ não depende da posição da partícula;
2. $\langle F_a(t) \rangle = 0$, ou seja, em média a força devida às flutuações térmicas provenientes do reservatório é nula;
3. $\langle F_a(t) F_a(t') \rangle = 2D\delta(t - t')$ ($\delta(t)$ é o delta de Dirac usual).

A força aleatória depende essencialmente das características do reservatório, expressas através da constante D presente na propriedade 3. A fim de determiná-la, partiremos da solução da equação (3.4). Para tanto, vamos reescrevê-la na forma

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \Gamma \xi(t), \quad (3.6)$$

onde definimos a força aleatória como

$$F_a(t) = \sqrt{2D}\xi(t), \quad (3.7)$$

sendo $\gamma = \alpha/m$, $\Gamma = \sqrt{2D/m^2}$ e $\xi(t)$ uma variável aleatória dependente do tempo cujas proprieda-

Capítulo 3. Definições Gerais

des derivam imediatamente das propriedades 2 e 3 anteriores:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (3.8a)$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \delta(t - t') \quad (3.8b)$$

A solução geral da equação (3.6) é dada por

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + \Gamma e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \xi(t') dt', \quad (3.9)$$

em que a condição inicial é $v(t = 0) = v_0$. Para determinarmos a constante D devemos agora calcular a média e a variância da velocidade. A média é obtida facilmente aplicando a propriedade (3.8a) na solução (3.9). Assim, temos

$$\langle v \rangle = v_0 e^{-\gamma t}. \quad (3.10)$$

A variância, por sua vez, é obtida primeiro notando que

$$v - \langle v \rangle = \Gamma e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \xi(t') dt', \quad (3.11)$$

em seguida, elevando a expressão (3.11) ao quadrado e usando a propriedade (3.8b), obtemos

$$\begin{aligned} \langle (v - \langle v \rangle)^2 \rangle &= \Gamma^2 e^{-2\gamma t} \int_0^t \int_0^t \langle \xi(t') \xi(t'') \rangle e^{\gamma(t'+t'')} dt' dt'', \\ \langle (v - \langle v \rangle)^2 \rangle &= \Gamma^2 e^{-2\gamma t} \int_0^t e^{2\gamma t'} dt'. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Efetuada a integral em (3.12), chegamos à variância da velocidade

$$\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = \frac{\Gamma^2}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}). \quad (3.13)$$

Substituindo então a expressão (3.10) na (3.13) obtemos a velocidade quadrática média

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\Gamma^2}{2\gamma} + \left(v_0^2 - \frac{\Gamma^2}{2\gamma} \right) e^{-2\gamma t}. \quad (3.14)$$

No regime estacionário ($t \rightarrow \infty$), quando o sistema atinge o equilíbrio térmico, a velocidade

3.2. Reservatórios Térmicos e a Dinâmica de Langevin

quadrática média se torna

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\Gamma^2}{2\gamma}. \quad (3.15)$$

Pelo Teorema da Equipartição de Energia, sabemos que

$$\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T, \quad (3.16)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura (absoluta) do reservatório térmico. Substituindo o resultado (3.15) na expressão (3.16), temos

$$\Gamma^2 = \frac{2\gamma k_B T}{m} \Rightarrow D = \alpha k_B T, \quad (3.17)$$

onde recuperamos as definições $\Gamma = \sqrt{2D/m^2}$ e $\gamma = \alpha/m$.

A força estocástica é, portanto, dada por

$$F_a(t) = \sqrt{2\alpha k_B T} \xi(t), \quad (3.18)$$

sendo $\xi(t)$ um ruído aleatório que obedece às propriedades (3.8). É importante mencionar que a força estocástica (3.18) representa a flutuação térmica proveniente de diversas colisões aleatórias entre a partícula e as moléculas que constituem o reservatório. Logo, segue do *teorema central do limite* que $F_a(t)$ é dada, com excelente aproximação, por uma distribuição normal de média nula e variância que depende das características do reservatório.

Uma vez definida a parte estocástica da dinâmica das partículas das extremidades da cadeia, podemos escrever as equações de movimento completas para o sistema:

$$m_1 \frac{dv_1}{dt} = F_1 - \alpha v_1 + \sqrt{2\alpha k_B T_A} \xi_1(t), \quad (3.19a)$$

$$m_\ell \frac{dv_\ell}{dt} = F_\ell, \quad 2 \leq \ell \leq L-1, \quad (3.19b)$$

$$m_L \frac{dv_L}{dt} = F_L - \alpha v_L + \sqrt{2\alpha k_B T_B} \xi_L(t). \quad (3.19c)$$

Ressaltamos que o sistema de equações (3.19) tem caráter bastante geral, de forma que pode ser aplicado em qualquer um dos modelos citados no capítulo anterior, bastando calcular as forças de interação F_k explicitamente a partir de seus hamiltonianos específicos. De maneira análoga, aplicaremos, mais adiante, este mesmo conjunto de equações ao modelo que propomos neste trabalho.

Uma outra forma de descrevermos o sistema é através da distribuição de probabilidades $P(x, v, t)$, onde $x = (x_1, x_2, \dots, x_L)$ e $v = (v_1, v_2, \dots, v_L)$, cuja evolução é dada pela *equação de*

Fokker-Planck

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \mathcal{L}P, \quad (3.20)$$

sendo $\mathcal{L}$ o operador usual de Fokker-Planck que engloba a dinâmica de Langevin, tal que

$$\mathcal{L}P = - \sum_{k=1}^L \left\{ \frac{\partial}{\partial x_k} (v_k P) + \frac{\partial}{\partial v_k} [(f_k - \gamma_k v_k) P] \right\} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^L \Gamma_k^2 \frac{\partial^2 P}{\partial v_k^2}. \quad (3.21)$$

Aqui, $f_k = F_k/m_k$ para $1 \leq k \leq L$, $\gamma_k = \alpha/m_k$ e $\Gamma_k^2 = 2\alpha k_B T_k/m_k^2$ para $k = 1$ e $k = L$, e zero caso contrário; $T_1 = T_A$ e $T_L = T_B$.

Apesar da equivalência entre as equações diferenciais estocásticas (3.19) e a equação de Fokker-Planck para a distribuição de probabilidades (3.20), utilizaremos a primeira abordagem, dada a praticidade computacional em se implementar algoritmos para resolver numericamente tal conjunto de equações.

3.3 Temperatura

A temperatura é a grandeza mais fundamental relacionada aos fenômenos de transporte de calor. Para que possamos interpretar os resultados provenientes das simulações, é necessário definirmos esta grandeza através das variáveis dinâmicas do sistema.

Duas definições são geralmente utilizadas. A primeira delas, adotada no *ensemble* canônico, é definida a partir da energia cinética média de um sistema em equilíbrio

$$T = \frac{1}{k_B L} \left\langle \sum_{i=1}^L \frac{p_i^2}{m_i} \right\rangle = \frac{2}{k_B L} \left\langle \sum_{i=1}^L \frac{m_i v_i^2}{2} \right\rangle, \quad (3.22)$$

onde $p_i = m_i v_i$ é o momento da i -ésima partícula. Para sistemas fora do equilíbrio, entretanto, é mais conveniente uma definição local de temperatura, definida a partir da energia cinética da i -ésima partícula

$$T_i = \frac{1}{k_B} \left\langle \frac{p_i^2}{m_i} \right\rangle = \frac{2}{k_B} \left\langle \frac{m_i v_i^2}{2} \right\rangle. \quad (3.23)$$

Utilizaremos, portanto, a definição local de temperatura (3.23) em nossas análises, como por exemplo, para estabelecer o perfil de temperaturas das partículas ao longo da cadeia e verificar a existência, ou não, de um gradiente de temperatura.

3.4 Fluxo de Calor

A outra grandeza fundamental para o desenvolvimento do trabalho é o fluxo de calor. E assim como a temperatura, é preciso uma definição local para tal grandeza em termos das variáveis dinâmicas do sistema.

Para determinarmos o fluxo de calor, definimos primeiro a densidade de energia por sítio de uma cadeia composta por L partículas

$$\epsilon_1 = \frac{p_1^2}{2m_1} + V(x_1) + \frac{1}{2}U(x_1 - x_2), \quad (3.24a)$$

$$\epsilon_\ell = \frac{p_\ell^2}{2m_\ell} + V(x_\ell) + \frac{1}{2}[U(x_{\ell-1} - x_\ell) + U(x_\ell - x_{\ell+1})], \quad 2 \leq \ell \leq L-1, \quad (3.24b)$$

$$\epsilon_L = \frac{p_L^2}{2m_L} + V(x_L) + \frac{1}{2}U(x_{L-1} - x_L), \quad (3.24c)$$

de forma que seu hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^L \epsilon_k = \sum_{k=1}^L \left[\frac{p_k^2}{2m_k} + V(x_k) \right] + \sum_{k=1}^{L-1} U(x_k - x_{k+1}), \quad (3.25)$$

conforme a expressão (3.1).

Tomando-se a derivada¹ temporal das equações (3.24), obtemos

$$\dot{\epsilon}_1 = v_1 \dot{p}_1 + V'_1 \dot{x}_1 + \frac{1}{2}(\dot{x}_1 - \dot{x}_2) U'_{1,2}, \quad (3.26a)$$

$$\dot{\epsilon}_\ell = v_\ell \dot{p}_\ell + V'_\ell \dot{x}_\ell + \frac{1}{2}[(\dot{x}_{\ell-1} - \dot{x}_\ell) U'_{\ell-1,\ell} + (\dot{x}_\ell - \dot{x}_{\ell+1}) U'_{\ell,\ell+1}], \quad 2 \leq \ell \leq L-1, \quad (3.26b)$$

$$\dot{\epsilon}_L = v_L \dot{p}_L + V'_L \dot{x}_L + \frac{1}{2}(\dot{x}_{L-1} - \dot{x}_L) U'_{L-1,L}, \quad (3.26c)$$

onde adotamos a notação simplificada $V(x_k) = V_k$ e $U(x_k - x_{k+1}) = U_{k,k+1}$. Assumindo que as partículas das extremidades da cadeia estão em contato com reservatórios térmicos mantidos a temperaturas T_A e T_B , a dinâmica do sistema é descrita, como já vimos, pelas equações de Langevin

$$\dot{x}_k = v_k, \quad \dot{p}_k = F_k + f_A \delta_{k,1} + f_B \delta_{k,L}, \quad 1 \leq k \leq L \quad (3.27)$$

em que

$$F_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_k} = -(V'_k + U'_{k,k+1} - U'_{k-1,k}) \quad (3.28)$$

¹Indicaremos por ponto as derivadas temporais e por linha as derivadas em relação ao argumento das funções.

Capítulo 3. Definições Gerais

é a força devida aos potenciais $V(x)$ e $U(x)$ e $f_{A,B} = -\alpha v_{1,L} + \sqrt{2\alpha k_B T_{A,B}} \xi(t)$ é a força devida aos reservatórios térmicos.

Substituindo-se então (3.27) e (3.28) em (3.26), e após algumas manipulações, chegamos à

$$\dot{\epsilon}_1 = j_{1,A} - j_{2,1}, \quad (3.29a)$$

$$\dot{\epsilon}_\ell = j_{\ell,\ell-1} - j_{\ell+1,\ell}, \quad 2 \leq \ell \leq L-1, \quad (3.29b)$$

$$\dot{\epsilon}_L = j_{L,L-1} + j_{L,B}, \quad (3.29c)$$

onde definimos os fluxos

$$j_{1,A} = f_A v_1, \quad (3.30a)$$

$$j_{\ell,\ell-1} = \frac{1}{2} f_{\ell,\ell-1} (v_{\ell-1} + v_\ell), \quad 2 \leq \ell \leq L-1, \quad (3.30b)$$

$$j_{L,B} = f_B v_L, \quad (3.30c)$$

com $f_{\ell,\ell+1} = -f_{\ell+1,\ell} = -U'_{\ell,\ell+1}$ sendo a força de interação entre as partículas.

Duas propriedades interessantes podem ser notadas das equações (3.29). A primeira é que os fluxos locais $j_{\ell,\ell-1}$ não dependem do potencial local $V(x)$, mas apenas da interação entre as partículas, dada por $U(x)$. A segunda propriedade é obtida ao somarmos as três equações

$$\sum_{k=1}^L \dot{\epsilon}_k = \frac{d}{dt} \left[\sum_{k=1}^L \epsilon_k \right] = \frac{d\mathcal{H}}{dt} = j_{1,A} + j_{L,B}, \quad (3.31)$$

ou seja, a variação da energia do sistema depende apenas dos fluxos provenientes dos reservatórios térmicos $j_{1,A}$ e $j_{L,B}$ através das partículas das extremidades. A equação (3.31) pode ser interpretada como a versão discreta da equação de continuidade (2.2), agora escrita em termos das variáveis dinâmicas do sistema x_k e v_k .

Estamos particularmente interessados no estado estacionário do sistema. Nesse caso, usamos o valor médio $\langle dU/dt \rangle = 0$ para verificar que

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d}{dt} U_{k,k+1} \right\rangle &= \left\langle U'_{k,k+1} (\dot{x}_k - \dot{x}_{k+1}) \right\rangle = \left\langle -f_{k,k+1} (v_k - v_{k+1}) \right\rangle = 0 \\ \Rightarrow \langle f_{k,k+1} v_k \rangle &= \langle f_{k,k+1} v_{k+1} \rangle. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Aplicando o resultado (3.32) na expressão (3.30b) e lembrando que $f_{\ell,\ell+1} = -f_{\ell+1,\ell}$, temos que

$$\langle j_{\ell,\ell-1} \rangle = \langle f_{\ell,\ell-1} v_\ell \rangle, \quad 2 \leq \ell \leq L-1. \quad (3.33)$$

3.5. Coeficiente de Retificação

Notamos que a expressão anterior não define o valor para os fluxos provenientes dos reservatórios, $\langle j_{1,A} \rangle$ e $\langle j_{L,B} \rangle$, que valem

$$\langle j_{1,A} \rangle = \alpha \left[\frac{k_B T_A}{m_1} - \langle v_1^2 \rangle \right], \quad (3.34a)$$

$$\langle j_{L,B} \rangle = \alpha \left[\frac{k_B T_B}{m_L} - \langle v_L^2 \rangle \right]. \quad (3.34b)$$

Estes resultados podem ser obtidos calculando-se o valor médio da expressão (3.31) através da equação de Fokker-Planck (3.20). Os detalhes deste cálculo podem ser vistos no [Apêndice A](#).

Também no estado estacionário, $\langle \dot{\epsilon}_k \rangle = 0$. Dessa forma, concluímos das equações (3.29) que

$$\langle j_{1,A} \rangle = \langle j_{2,1} \rangle = \langle j_{3,2} \rangle = \dots = \langle j_{L,L-1} \rangle = -\langle j_{L,B} \rangle \equiv J. \quad (3.35)$$

Este resultado mostra que o fluxo é constante ao longo da cadeia e portanto reflete o fato de que energia só pode entrar ou sair do sistema pelas extremidades.

Os resultados (3.33) e (3.35) são de extrema relevância para as simulações pois são exatos, sendo a igualdade dos fluxos ao longo da cadeia uma boa medida para se verificar se o sistema atingiu de fato o estado estacionário.

3.5 Coeficiente de Retificação

Para finalizarmos as definições das grandezas envolvidas em nosso trabalho, vamos quantificar o fenômeno da retificação térmica definindo o *coeficiente de retificação* R .

Como vimos na [Seção 2.2](#), o fenômeno da retificação é caracterizado por uma variação no valor absoluto do fluxo de calor quando a posição (ou equivalentemente, a temperatura) dos reservatórios é trocada. E é através dessa variação que definimos o coeficiente R . Para tanto, vamos denotar por J o fluxo de calor para uma dada configuração dos reservatórios e J' o fluxo de calor correspondente quando a posição dos reservatórios é trocada. Assim, definimos o coeficiente de retificação como

$$R = \frac{|J| - |J'|}{|J| + |J'|}, \quad (3.36)$$

o qual será utilizado em todas as nossas análises posteriores. Este coeficiente varia no intervalo $-1 \leq R \leq 1$, sendo zero quando não há retificação ($|J| = |J'|$) e ± 1 quando uma das duas direções atua como um isolante térmico perfeito ($|J'| = 0$ ou $|J| = 0$).

Lembramos ainda que a definição do coeficiente R não é única, podendo ser representada por qualquer função do tipo $R = R(J, J')$ que quantifique de maneira adequada a variação do fluxo de calor quando a configuração dos reservatórios térmicos é trocada.

Capítulo 4

Modelo Microscópico

O modelo que propomos neste trabalho consiste em uma cadeia de L partículas idênticas acopladas entre si através de interações harmônicas de primeiros vizinhos. As partículas estão sujeitas também a um *pinning* anarmônico quártico, e as partículas das extremidades estão em contato com reservatórios térmicos mantidos a temperaturas T_A e T_B distintas, conforme o esquema geral já apresentado anteriormente.

O hamiltoniano da cadeia é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^L \frac{1}{2} m v_k^2 + \frac{k}{2} \sum_{k=0}^L (x_k - x_{k+1})^2 + \frac{g_L}{4} \sum_{k=1}^{L/2} x_k^4 + \frac{g_R}{4} \sum_{k=L/2+1}^L x_k^4, \quad (4.1)$$

com condições de contorno fixas, $x_0 = x_{L+1} = 0$. m é a massa de cada partícula e x_i e v_i suas coordenadas e velocidades respectivamente. Os dois primeiros termos do lado direito da expressão anterior correspondem respectivamente às energias cinética e de interação entre as partículas. A intensidade do acoplamento harmônico k é constante e os dois últimos termos, referentes ao potencial local, são distintos para as metades¹ esquerda (g_L) e direita (g_R) da cadeia. Comparando-se o hamiltoniano acima com o hamiltoniano geral (3.1), identificamos, portanto, os potenciais

$$U(x_k - x_{k+1}) = \frac{k}{2} (x_k - x_{k+1})^2, \quad (4.2a)$$

$$V(x_k) = \frac{g_k}{4} x_k^4, \quad (4.2b)$$

tal que $g_k = g_L$ para $1 \leq k \leq L/2$ e $g_k = g_R$ para $L/2 + 1 \leq k \leq L$. É importante notar que, além da anarmonicidade (necessária para que o sistema apresente uma condutividade térmica

¹Por simplicidade vamos considerar apenas cadeias com número par de partículas.

dependente da temperatura), o *pinning* quártico age também como uma fonte de assimetria (quando $g_L \neq g_R$). Esses dois “ingredientes”, conforme já mencionamos anteriormente, são necessários para garantir a presença de retificação térmica no sistema.

A dinâmica do modelo é dada pelo sistema de equações diferenciais estocásticas (3.19)

$$m \frac{dv_1}{dt} = F_1 - \alpha v_1 + \sqrt{2\alpha k_B T_A} \xi_1(t), \quad (4.3a)$$

$$m \frac{dv_\ell}{dt} = F_\ell, \quad 2 \leq \ell \leq L-1, \quad (4.3b)$$

$$m \frac{dv_L}{dt} = F_L - \alpha v_L + \sqrt{2\alpha k_B T_B} \xi_L(t). \quad (4.3c)$$

sendo

$$F_1 = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_1} = k(x_2 - 2x_1) - g_L x_1^3, \quad (4.4a)$$

$$F_\ell = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_\ell} = k(x_{\ell-1} + x_{\ell+1} - 2x_\ell) - g_\ell x_\ell^3, \quad (4.4b)$$

$$F_L = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_L} = k(x_{L-1} - 2x_L) - g_R x_L^3. \quad (4.4c)$$

O caráter restaurador da força devida ao potencial anarmônico local fica evidente ao olharmos para o segundo termo do lado direito das expressões (4.4): para $x_k > 0$, $-g_k x_k^3 < 0$ e para $x_k < 0$, $-g_k x_k^3 > 0$, ou seja, esta força tende a manter a partícula do k -ésimo sítio em sua posição de equilíbrio² ($x_k = 0$).

Além das dinâmicas hamiltoniana e estocástica (proveniente dos reservatórios térmicos), vamos introduzir no modelo uma outra dinâmica de caráter estocástico, devida a colisões elásticas aleatórias entre as partículas e graus de liberdade externos ao sistema (não inclusos da dinâmica hamiltoniana), expressa na forma de um ruído que inverte aleatoriamente o sentido das velocidades das partículas. A seguir, vamos introduzir tal ruído, descrevendo a forma como ele é modelado a partir de processos aleatórios.

4.1 O Ruído de Inversão de Velocidade

O ruído de inversão de velocidade consiste em um processo estocástico que inverte aleatoriamente os sinais das velocidades das partículas com uma certa taxa λ . Conforme já mencionado, este ruído representa um ingrediente chave para que o sistema apresente uma retificação térmica finita no limite termodinâmico, além de garantir a validade da lei de Fourier.

²Daí o termo *pinning*.

4.1. O Ruído de Inversão de Velocidade

O ruído é modelado partindo-se da suposição de que as inversões das velocidades das partículas acontecem na forma de eventos discretos (colisões elásticas aleatórias) que se passam em tempo contínuo. Podemos considerar a ocorrência destes eventos como um *processo de Poisson* [2].

O processo de Poisson $N(t)$ é essencialmente um processo que conta o número de vezes que um determinado evento ocorre em um certo intervalo de tempo $[0, t]$, em que $N(0) = 0$. A variável aleatória $N(t)$ é inteira e não-negativa, e segue a distribuição de Poisson com parâmetro λt

$$P_\ell = e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t)^\ell}{\ell!}, \quad \ell \geq 0, \quad (4.5)$$

onde P_ℓ é a probabilidade de que $\ell = N(t + \tau) - N(\tau)$ eventos ocorram entre os instantes τ e $t + \tau$.

Figura 4.1: (a) Amostra de um processo de Poisson com taxa $\lambda = 1$. O *inset* mostra a “trajetória” completa da qual a amostra foi retirada. O intervalo de tempo entre dois “saltos” consecutivos é conhecido como *tempo de espera* e é identificado no gráfico como t_{espera} . (b) Distribuição dos tempos de espera do processo de Poisson da figura (a). A curva preta representa uma distribuição exponencial de parâmetro $\lambda = 1$.

Uma amostra típica de um processo de Poisson pode ser vista na [Figura 4.1a](#), onde notamos que o processo é caracterizado por “saltos” que representam a contagem de um novo evento. Uma característica importante dos processos de Poisson é que os intervalos de tempo entre dois “saltos” consecutivos, denominados *tempos de espera*, são distribuídos exponencialmente com a mesma taxa λ da distribuição (4.5)

$$\rho(t) = \lambda e^{-\lambda t}, \quad (4.6)$$

sendo $\rho(t)$ a densidade de probabilidade e t os tempos de espera. Esta distribuição pode ser vista na [Figura 4.1b](#).

Fisicamente, o ruído de inversão de velocidades assume, portanto, a forma de uma força impulsiva $\mathcal{F}(t)$ que atua aleatoriamente sobre as partículas em intervalos de tempo distribuídos exponencialmente conforme a expressão (4.6). Tal força pode ser representada pela expressão

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(t) &= m \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[v(t_{\ell}^{+}) - v(t_{\ell}^{-}) \right] \delta(t - t_{\ell}), \\ \mathcal{F}(t) &= -2m \sum_{\ell=1}^{\infty} v(t_{\ell}^{-}) \delta(t - t_{\ell}),\end{aligned}\tag{4.7}$$

de forma que, após uma colisão ocorrida no instante t_{ℓ} , a velocidade da partícula muda de $v(t_{\ell}^{-})$ para $v(t_{\ell}^{+}) = -v(t_{\ell}^{-})$, sendo t_{ℓ} os tempos de espera estocásticos entre as colisões. Como o módulo das velocidades das partículas não é alterado durante as colisões, a energia cinética, e consequentemente a energia total do sistema, são conservadas. Assim, o único processo de transferência de energia entre o sistema e o meio é através da interação das partículas com os reservatórios térmicos.

Por fim, podemos reescrever o conjunto de equações de movimento (4.3) do sistema, incluindo agora a força aleatória (4.7)

$$m \frac{dv_1}{dt} = F_1 + \mathcal{F}_1(t) - \alpha v_1 + \sqrt{2\alpha k_B T_A} \xi_1(t),\tag{4.8a}$$

$$m \frac{dv_{\ell}}{dt} = F_{\ell} + \mathcal{F}_{\ell}(t), \quad 2 \leq \ell \leq L-1,\tag{4.8b}$$

$$m \frac{dv_L}{dt} = F_L + \mathcal{F}_L(t) - \alpha v_L + \sqrt{2\alpha k_B T_B} \xi_L(t),\tag{4.8c}$$

em que as forças F_k são dadas pelas expressões (4.4).

Podemos reescrever também a equação de Fokker-Planck (3.20) acrescentando o termo correspondente ao ruído de inversão de velocidades

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \mathcal{L}P + \lambda \sum_{i=1}^L \left[P(v^i) - P(v) \right],\tag{4.9}$$

sendo λ a taxa do ruído de inversão de velocidades, com $v^k = (v_1, v_2, \dots, -v_k, \dots, v_L)$ e $\mathcal{L}$ o operador usual de Fokker-Planck que engloba a dinâmica de Langevin, dado pela expressão (3.21). Podemos verificar que o termo referente ao ruído de inversão de velocidade não contribui para a evolução da energia do sistema, uma vez que esta é invariante sob a mudança $v_k \rightarrow -v_k$, o que caracteriza este ruído como conservativo, como havíamos previamente mencionado.

4.2 Simulações Numéricas

Uma vez definidas a dinâmica do sistema e as grandezas físicas relevantes para nossas análises, descreveremos agora o método utilizado para as simulações numéricas das equações de movimento do sistema, apresentando detalhadamente os algoritmos implementados.

O método de integração numérica da dinâmica do sistema, dada pelas equações de movimento (3.19) juntamente com o hamiltoniano (4.1), foi dividido em três partes distintas.

A parte determinística das equações de movimento das partículas no interior da cadeia, dada por (4.3b)

$$m \frac{dv_\ell}{dt} = F_\ell, \quad 2 \leq \ell \leq L-1, \quad (4.10)$$

sendo $F_\ell = k(x_{\ell-1} + x_{\ell+1} - 2x_\ell) - g_\ell x_\ell^3$, foi integrada numericamente através do *algoritmo de Verlet* [49]. Trata-se de um algoritmo simplético, ou seja, que conserva a forma do espaço de fase do sistema garantindo que a conservação da energia total seja verificada para longos tempos de integração. Além de estabilidade numérica, o algoritmo de Verlet apresenta reversibilidade temporal, propriedade importante ao simular sistemas físicos. Existem duas formas equivalentes de escrever o algoritmo: a versão básica (também conhecida como Störmer-Verlet), onde apenas as posições das partículas são determinadas explicitamente, sendo que as velocidades devem ser calculadas em passos intermediários, e a versão que utilizamos neste trabalho, conhecida como Verlet de Velocidade (ou em inglês, *Velocity Verlet*), em que posições e velocidades são calculadas no mesmo passo de integração. Esta versão do algoritmo pode ser escrita como [50]

$$x_\ell^{n+1} = x_\ell^n + v_\ell^n \Delta t + \frac{\Delta t^2}{2m} F_\ell^n, \quad (4.11a)$$

$$v_\ell^{n+1} = v_\ell^n + \frac{\Delta t}{2m} (F_\ell^n + F_\ell^{n+1}), \quad (4.11b)$$

em que $x_\ell^n = x_\ell(t_n)$, $v_\ell^n = v_\ell(t_n)$ e $F_\ell^n = F_\ell(x_\ell^n, t_n)$ correspondem, respectivamente, à posição, velocidade e força da ℓ -ésima partícula no instante t_n , e $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ corresponde ao passo de integração. O erro efetivo cometido, tanto para as posições quanto para as velocidades, é da ordem $\mathcal{O}(\Delta t^3)$, ou seja, o método é preciso até Δt^2 , o que caracteriza o algoritmo como um integrador de segunda ordem.

Já as partículas das extremidades, que estão em contato com reservatórios térmicos, têm sua dinâmica governada pelas equações de Langevin (4.3a) e (4.3c)

$$m \frac{dv_1}{dt} = F_1 - \alpha v_1 + \sqrt{2\alpha k_B T_A} \xi_1(t), \quad (4.12a)$$

$$m \frac{dv_L}{dt} = F_L - \alpha v_L + \sqrt{2\alpha k_B T_B} \xi_L(t), \quad (4.12b)$$

Capítulo 4. Modelo Microscópico

com $F_1 = k(x_2 - 2x_1) - g_L x_1^3$ e $F_L = k(x_{L-1} - 2x_L) - g_R x_L^3$. Para integrá-las, usamos a versão estocástica do algoritmo Verlet de Velocidade, desenvolvido por Grønbech-Jensen & Farago [51] a partir da integração das equações de Langevin do tipo (4.12). O algoritmo é dado por

$$x_\ell^{n+1} = x_\ell^n + bv_\ell^n \Delta t + \frac{b\Delta t^2}{2m} F_\ell^n + \frac{b\Delta t}{2m} \sqrt{2\alpha k_B T \Delta t} \xi_\ell^{n+1}, \quad (4.13a)$$

$$v_\ell^{n+1} = av_\ell^n + \frac{\Delta t}{2m} (aF_\ell^n + F_\ell^{n+1}) + \frac{b}{m} \sqrt{2\alpha k_B T \Delta t} \xi_\ell^{n+1}, \quad (4.13b)$$

para $\ell = \{1, L\}$. Os parâmetros a e b são definidos como

$$a \equiv \frac{1 - \frac{\alpha \Delta t}{2m}}{1 + \frac{\alpha \Delta t}{2m}}, \quad b \equiv \frac{1}{1 + \frac{\alpha \Delta t}{2m}}, \quad (4.14)$$

e o ruído ξ_ℓ^{n+1} , definido como

$$\xi_\ell^{n+1} \equiv \int_{t_n}^{t_{n+1}} \xi_\ell(t') dt', \quad (4.15)$$

é um número aleatório gaussiano tal que $\langle \xi_\ell^n \rangle = 0$ e $\langle \xi_\ell^n \xi_{\ell'}^m \rangle = \delta_{n,m} \delta_{\ell,\ell'}$. Notamos que se $\alpha = 0$ (isto é, as partículas são desacopladas dos reservatórios), as equações (4.13) se reduzem à versão determinística do algoritmo, dada pelas equações (4.11). Várias foram as razões pela escolha deste método. Primeiramente, sua baixa complexidade computacional pois, assim como a versão determinística, é de fácil implementação. Segundo, por sua eficiência, já que apenas um número aleatório (para cada partícula acoplada ao reservatório) é gerado por passo de integração. Finalmente, precisão, que assim como no caso anterior, é da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

Por fim, a implementação do ruído de inversão de velocidade, que atua sobre todas as partículas da cadeia, pode ser tratada da seguinte maneira: para cada partícula, em cada passo de tempo de integração Δt , nós invertemos a velocidade da partícula com probabilidade $p = \lambda \Delta t$, sendo λ a taxa de inversão. Este procedimento gera um processo de Poisson com tempos de espera discretos $t_{\text{espera}} = \ell \Delta t$ (conforme a Figura 4.1), sendo ℓ o número de passos de integração entre duas inversões, distribuídos de acordo com a distribuição geométrica $p(1-p)^\ell$. No limite em que $\Delta t \rightarrow 0$, essa distribuição tende à distribuição exponencial do tipo (4.6). Este método, apesar de funcional, é pouco eficiente pois é necessário gerar um número aleatório (por partícula) em cada passo de integração, tornando a simulação bastante lenta quando feita para longos intervalos de tempo. Uma implementação mais eficiente pode ser feita da seguinte forma. Para cada partícula, geramos um tempo de espera aleatório τ_i a partir da distribuição exponencial (4.6) com parâmetro λ . Em cada passo de tempo decrescemos de Δt cada tempo

4.2. Simulações Numéricas

de espera τ_i , de forma que, quando τ_i se tornar negativo, invertemos a velocidade v_i da partícula. O resultado é o mesmo em relação ao procedimento anterior, porém obtido de forma mais eficiente, já que é necessário gerar menos números aleatórios por partículas durante o processo de integração do sistema, e ao mesmo tempo possibilitando o uso de um Δt maior sem perda de precisão.

A partir destas três etapas, implementamos um programa escrito em C++ para simularmos o sistema em questão. A parte central do programa pode ser vista no **Apêndice B**. Os parâmetros numéricos utilizados ao longo de todas as simulações realizadas juntamente com os resultados e análises serão apresentados no capítulo a seguir.

Capítulo 5

Resultados e Análises

Tendo todas as definições introduzidas, vamos apresentar agora os resultados obtidos através das simulações do nosso sistema. Os resultados serão divididos em duas partes. A primeira é referente à lei de Fourier, onde analisaremos as condições para sua validade em termos do potencial local e do ruído de inversão de velocidade. Em seguida, na segunda parte, faremos a análise referente ao fenômeno da retificação térmica também em função do potencial local e do ruído conservativo, além de verificarmos sua dependência com o tamanho do sistema.

Ao longo de todas as simulações, adotamos massas unitárias para todas as partículas. A constante harmônica de interação entre as partículas foi fixada em $k = 1$ e o termo de acoplamento entre as partículas das extremidades e seus respectivos reservatórios térmicos foi adotada como $\alpha = 0.1$. Além disso, a constante do potencial local para a metade direita da cadeia foi fixado em $g_R = 5$. Para a metade esquerda, trabalhamos com os valores $g_L = 0$ e $g_L = 1$, a fim de introduzirmos a assimetria necessária para o surgimento de retificação térmica. A constante de Boltzmann em todos os casos vale $k_B = 1$.

As temperaturas dos reservatórios térmicos foram definidas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} T_A &= T_0 (1 + \Delta), \\ T_B &= T_0 (1 - \Delta), \end{aligned} \tag{5.1}$$

tal que T_0 é a média das temperaturas e $\Delta = -\Delta T/2T_0$, com $\Delta T = T_B - T_A$ e $-1 \leq \Delta \leq 1$, é um parâmetro adimensional que representa o quão “distante” o sistema está do equilíbrio. Note que as temperaturas dos reservatórios são trocadas entre si quando fazemos a mudança $\Delta \rightarrow -\Delta$, tornando esta definição conveniente para a análise da retificação térmica. Por simplicidade, fixamos $T_0 = 1$. Para as temperaturas das partículas, foi adotada a definição (3.23), de forma que, $T_i = \langle v_i^2 \rangle$.

Frisamos ainda que todas as simulações foram feitas com um tempo transiente da ordem de 10^5 para garantir que o sistema atingisse o estado estacionário e o cálculo das médias dos fluxos (já no estado estacionário) foi feito considerando-se um tempo da ordem de 10^7 para que uma boa precisão fosse obtida.

5.1 Lei de Fourier

Conforme mencionamos na [Seção 2.1](#), o modelo ϕ^4 , dado pelo hamiltoniano (4.1) com $g_L = g_R$, obedece a lei de Fourier. Entretanto, para o modelo assimétrico ($g_L \neq g_R$) que estamos utilizando (sem a inclusão do ruído conservativo), a validade de tal lei não é óbvia. Em particular, para a configuração $(g_L, g_R) = (0, 5)$, a metade esquerda da cadeia é harmônica e, como também já vimos, este modelo não satisfaz a lei de Fourier.

A [Figura 5.1](#) mostra o perfil de temperatura T_i para os modelos ϕ^4 , com $(g_L, g_R) = (5, 5)$ e assimétrico, com $(g_L, g_R) = (0, 5)$. Notamos claramente que para o caso assimétrico há

Figura 5.1: Perfil de temperatura $T_i = \langle v_i^2 \rangle$ em função da posição da i -ésima partícula. Os resultados são para uma cadeia composta por 32 partículas para $g_L = 0$ e $g_L = 5$. As temperaturas dos reservatórios são tais que $T_A = 1.9$ e $T_B = 0.1$ ($\Delta = 0.9$). Em ambos os casos, não incluímos o ruído conservativo ($\lambda = 0$).

dois comportamentos distintos: a metade esquerda, onde $g_L = 0$, apresenta um perfil plano, semelhante ao da [Figura 2.1](#), exatamente por apresentar apenas interações harmônicas. Já a metade direita, onde $g_R = 5$, o perfil é decrescente devido à presença do *pinning* anarmônico quártico. Para a cadeia simétrica, com $g_L = g_R = 5$, o perfil é contínuo e decrescente, ou seja, não apresenta um salto como no caso anterior. Já a curvatura do perfil é devido ao fato do sistema estar “longe” do equilíbrio ($\Delta = 0.9$), conforme analisado por Aoki *et al.* [20].

O perfil de temperatura, apesar de evidenciar os comportamentos distintos para as metades

5.1. Lei de Fourier

esquerda e direita da cadeia assimétrica, é inconclusivo em relação à validade da lei de Fourier. Uma análise mais precisa é feita verificando o comportamento do fluxo de calor em relação ao tamanho da cadeia. Este resultado é mostrado na [Figura 5.2](#). Vemos que, para L suficientemente

Figura 5.2: Fluxo de calor em função do comprimento da cadeia, com e sem a presença do ruído conservativo (valores de λ mostrados na legenda). O fluxo J (pontos preenchidos) corresponde à configuração de temperaturas $\Delta = 0.9$ e J' (pontos abertos) corresponde à $\Delta = -0.9$. A linha tracejada possui inclinação -1 .

grande, os fluxos em ambas as direções ($\Delta \pm 0.9$) são difusivos, ou seja, escalam com $1/L$ na presença do ruído de inversão de velocidade ($\lambda \neq 0$). Este resultado é esperado, uma vez que é sabido que o ruído conservativo leva à lei de Fourier [24–26], conforme mencionamos no capítulo anterior. Sem o ruído ($\lambda = 0$), entretanto, o comportamento difusivo não pode ser afirmado completamente, apesar de haver uma tendência assintótica aparente para tal. Uma análise mais acurada para tamanhos maiores deve ser feita para ratificar este resultado.

Um comportamento semelhante é observado quando analisamos o fluxo de calor em termos do ruído, como é mostrado na [Figura 5.3](#). Para λ suficientemente grande, os fluxos decaem com $1/\lambda$. Este resultado está de acordo com o resultado encontrado na referência [25] para a cadeia harmônica, o que sugere que a dependência do fluxo com o ruído é afetada apenas pela interação entre as partículas e não pelo potencial local. Essa hipótese é reforçada por mais um resultado da mesma referência, onde a dependência do fluxo de calor com o ruído para uma cadeia com interações anarmônicas do tipo (2.8) entre as partículas, escala aproximadamente com $\lambda^{-0.5}$.

A partir dessas duas análises é possível concluir portanto, que para L e λ suficientemente grandes, o fluxo de calor se comporta como

$$J \sim \frac{1}{\lambda L}. \quad (5.2)$$

Figura 5.3: Fluxos de calor J (pontos preenchidos) e J' (pontos abertos) em função da taxa λ do ruído conservativo. Novamente as temperaturas dos reservatórios são tais que $\Delta = \pm 0.9$. A linha tracejada tem inclinação -1 .

Este resultado, comparado à expressão (2.6), implica uma dependência da condutividade térmica κ com o ruído conservativo. E esta influência do ruído conservativo no sistema é o fator relevante para garantir a existência de uma retificação térmica não-nula no limite termodinâmico, conforme veremos a seguir.

5.2 Retificação Térmica

Como vimos na Seção 2.2, o fenômeno da retificação térmica foi verificado em diversos sistemas que possuíam algum tipo de assimetria. Tal assimetria é necessária para que o sistema não seja invariante sob a troca das posições dos reservatórios e, dessa forma, garantir que a magnitude do fluxo de calor varie.

Desta mesma forma, o sistema assimétrico que estamos considerando, com $(g_L, g_R) = (0, 5)$, também apresenta retificação quando a configuração das temperaturas dos reservatórios é trocada. Este resultado é mostrado na Figura 5.4. Claramente observamos uma assimetria no comportamento do fluxo de calor entre as regiões $\Delta > 0$ ($T_A > T_B$), onde a magnitude dos fluxos é maior, e $\Delta < 0$ ($T_A < T_B$), onde a magnitude é menor. Essa diferença nas magnitudes dos fluxos entre as duas regiões indica a presença de retificação térmica no sistema. Notamos ainda que a assimetria dos fluxos é acentuada quanto maior o valor absoluto de Δ . Uma característica importante deste resultado, entretanto, surge quando avaliamos a assimetria dos fluxos com o aumento do tamanho do sistema. Para $\Delta = \pm 0.9$ por exemplo, a assimetria para os tamanhos $L = 4$ e $L = 16$ é bastante expressiva, mas deixa de sê-la para tamanhos maiores, praticamente desaparecendo para $L = 1024$, onde o fluxo varia de forma praticamente linear com Δ . Isso

5.2. Retificação Térmica

Figura 5.4: Fluxo de calor J em função do parâmetro Δ para diversos tamanhos da cadeia assimétrica $(g_L, g_R) = (0,5)$. Resultado sem a inclusão do ruído conservativo ($\lambda = 0$).

significa que no limite termodinâmico o efeito da retificação desaparece. O mesmo ocorre para os diferentes modelos citados na Seção 2.2. Este fato contraria resultados experimentais, onde a retificação térmica é medida em sistemas físicos reais [32, 44–47].

A fim de garantir que a retificação térmica permaneça finita no limite termodinâmico, a inclusão do ruído conservativo se faz necessária. O papel desempenhado por tal ruído em relação a esse fenômeno pode ser visto ainda na Figura 5.2. Na ausência do ruído, quando $\lambda = 0$, os fluxos J , para $\Delta = 0.9$ e J' , para $\Delta = -0.9$, são inicialmente distintos para tamanhos pequenos da cadeia, mas gradualmente se aproximam e convergem para um mesmo valor quando o tamanho da cadeia aumenta. Este resultado reafirma nossa análise anterior de que a retificação se anula com o aumento do tamanho do sistema. Já na presença do ruído, para valores não nulos de λ , uma separação finita entre os fluxos J e J' é verificada, permanecendo para quaisquer tamanhos da cadeia considerados. Logo, para qualquer valor de λ não-nulo, a retificação térmica se mantém *finita* no limite termodinâmico.

Uma análise mais quantitativa da retificação é feita através do coeficiente de retificação, dado na expressão (3.36). É importante mencionar que o cálculo preciso do coeficiente R é uma tarefa difícil pois, além de envolver a diferença entre duas grandezas que apresentam uma alta flutuação estatística, os fluxos são pequenos quando L é grande, uma vez que $J \sim 1/L$. Além disso, as flutuações estatísticas aumentam substancialmente com a taxa λ do ruído conservativo.

A Figura 5.5 mostra o coeficiente R como função de L para diferentes valores de λ . Os fluxos J e J' foram calculados fixando-se $\Delta = \pm 0.9$. Observamos primeiro que para $\lambda = 0$ a retificação é grande para tamanhos pequenos, mas diminui com o aumento do tamanho do sistema e vai a zero no limite termodinâmico. Com a inclusão do ruído conservativo, entretanto, observamos que R tende a um valor não-nulo $R^* \approx 0.073$, se tornando, grosso modo, independente do

Figura 5.5: Coeficiente de retificação R como função do tamanho da cadeia L para diferentes valores de λ . Resultado calculado a partir da relação (3.36) e dos dados e parâmetros da Figura 5.2.

tamanho da cadeia para λ suficientemente grande.

Conclusões similares, que ratificam este último resultado, podem ser obtidas através da Figura 5.6, onde analisamos o coeficiente R em função da taxa do ruído conservativo λ para diferentes tamanhos do sistema. Se olharmos para o intervalo de λ pequeno ($10^{-5} \sim 10^{-4}$),

Figura 5.6: Coeficiente de retificação R como função da taxa do ruído conservativo λ para diferentes tamanhos da cadeia. A linha tracejada representa o valor assintótico $R^* = 0.073$ ao qual as curvas tendem para λ suficientemente grande.

observamos que a retificação diminui rapidamente de $R \sim 0.15$ a zero conforme L aumenta. Porém, para a região de λ grande ($10^0 \sim 10^1$), as curvas tendem a um valor comum de aproximadamente $R^* \approx 0.073$.

Até o momento, consideramos uma cadeia assimétrica em que sua metade esquerda é

5.3. Discussão e Conclusões

puramente harmônica, uma vez que não há efetivamente o termo devido ao *pinning* ($g_L = 0$). Para mostrar que essa escolha não influencia o efeito principal do ruído conservativo, vamos considerar agora uma configuração tal que $g_L \neq 0$. Na Figura 5.7 mostramos os fluxos e os respectivos coeficientes de retificação para $(g_L, g_R) = (1, 5)$. Como podemos observar, as

Figura 5.7: (a) Fluxos de calor e (b) coeficiente de retificação como função de L para alguns valores de λ , para $(g_L, g_R) = (1, 5)$. As temperaturas dos reservatórios são tais que $\Delta = \pm 0.9$.

conclusões são idênticas ao caso anterior: quando $\lambda = 0$, a retificação claramente tende a zero com o aumento de L . Já para $\lambda \neq 0$, a retificação permanece finita no limite termodinâmico.

5.3 Discussão e Conclusões

A lei de Fourier mostrou-se válida nos modelos estudados com a inclusão do ruído conservativo, concordando com os resultados obtidos por Landi e Oliveira ao analisar cadeias harmônicas e anarmônicas [25, 26]. A dependência do fluxo de calor com o ruído é tal que $J \sim \lambda^{-1}$ para λ grande, resultado também semelhante ao caso harmônico estudado nas referências citadas, porém diferente do caso anarmônico avaliado nestas mesmas referências, onde $J \sim \lambda^{-0.5}$. Este fato sugere que a dependência do sistema com o ruído esteja associada apenas à forma do potencial de interação entre as partículas e não ao potencial local. Sem o ruído ($\lambda = 0$), a validade da lei de Fourier não é certa para os modelos assimétricos, mas há um aparente comportamento assintótico que indica a presença de fluxos de calor difusivos ($\sim 1/L$) para tamanhos maiores que os considerados neste trabalho.

O efeito da retificação é verificado nos modelos assimétricos estudados com ($\lambda \neq 0$) e sem ($\lambda = 0$) o ruído conservativo. Porém, a dependência de tal efeito com o tamanho do sistema é completamente diferente em cada caso. Se assumirmos que de fato o modelo apresenta um comportamento difusivo mesmo quando $\lambda = 0$, então podemos escrever os fluxos, em primeira

aproximação, como

$$|J| = \frac{A}{L}, \quad |J'| = \frac{A'}{L}, \quad A, A' > 0 \quad (5.3)$$

tal que, a partir da equação (3.36), implica um coeficiente de retificação

$$R = \frac{A - A'}{A + A'}. \quad (5.4)$$

Nossos resultados mostram que, quando $\lambda = 0$, $A' = A$ e consequentemente a retificação é zero. A presença do ruído conservativo garante, portanto, uma retificação finita.

Quando $\lambda = 0$ podemos ter, por exemplo, uma situação onde

$$|J| = \frac{A}{L} + \frac{B}{L^2}, \quad |J'| = \frac{A}{L} + \frac{B'}{L^2}, \quad (5.5)$$

que, para L grande, levaria a um coeficiente de retificação

$$R \simeq \frac{B - B'}{2AL}. \quad (5.6)$$

Uma vez que $R \propto 1/L$, o efeito da retificação se torna desprezível no limite termodinâmico.

A retificação térmica, como já mencionamos, tem sido observada experimentalmente em sistemas macroscópicos [32, 44–47], ou seja, sistemas grandes sob o ponto de vista microscópico. Logo, a fim de comparar resultados provenientes de um modelo microscópico com resultados experimentais, nós entendemos que o limite termodinâmico deve ser considerado. Entretanto, na grande maioria dos modelos teóricos propostos, o efeito da retificação desaparece nesse limite. Além disso, em muitos desses modelos a validade da lei de Fourier, também observada experimentalmente, não é verificada, causando a falsa impressão de que sistemas difusivos não apresentam retificação térmica.

O propósito deste trabalho foi mostrar que a inclusão do ruído conservativo de inversão de velocidade conduz a ambos, lei de Fourier e retificação térmica finita no limite termodinâmico. O nosso estudo foi feito considerando-se duas cadeias anarmônicas clássicas com coeficientes diferentes para o *pinning*. Os resultados obtidos nos levam a conjecturar que a existência de uma retificação térmica finita na presença do ruído conservativo pode ser um comportamento universal, independente do modelo mecânico subjacente. Por fim, mencionamos que a explicação física para este efeito, embora não trivial, é certamente relacionada ao comportamento altamente caótico introduzido pelo ruído conservativo, o que torna o sistema ergódico [25].

Parte II

Sistema Quântico

Na segunda parte desta tese são abordados os fenômenos de transporte em sistemas quânticos. Mais precisamente, utilizamos uma cadeia de *spins* do tipo XX para estudar, além do transporte de energia, o transporte de magnetização quando as extremidades da cadeia estão em contato com reservatórios térmicos e de partículas. Nos capítulos a seguir, descrevemos em detalhes as principais características do modelo XX utilizado neste trabalho, incluindo a diagonalização exata de seu hamiltoniano, reescrito em termos de operadores fermiônicos, e sua transição de fase quântica. Formulamos a dinâmica de Lindblad de múltiplos sítios, utilizada para representar a interação do sistema com os reservatórios, e obtemos uma equação matricial exata para as covariâncias entre os operadores fermiônicos no estado estacionário. Obtemos soluções numéricas para tal equação, bem como propomos uma solução analítica aproximada para tamanhos arbitrários da cadeia, incluindo o limite termodinâmico. Calculamos os fluxos de energia e magnetização através da cadeia, além de verificarmos as relações de reciprocidade de Onsager entre eles. Todos os resultados apresentados nessa parte foram publicados na revista *Physical Review E* [52]. Uma cópia do artigo pode ser encontrada no [Apêndice C](#).

Capítulo 6

Fenômenos de Transporte em Sistemas Quânticos

Além de grande relevância acadêmica, o estudo dos fenômenos de transporte em sistemas quânticos possui um grande interesse aplicado, principalmente na área de física da matéria condensada, incluindo uma variedade de problemas importantes, que vão desde a medida da condutividade térmica [53] e o transporte eletrônico em metais e semicondutores [54, 55], até o transporte balístico de elétrons em sistemas mesoscópicos [56–60], *hopping* de átomos ultrafrios em redes ópticas [61, 62], transporte de mágnons em cristais de ferrita de ítrio [63, 64] (YIG, $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$) e spintrônica [65, 66] pois constituem a base para a criação e desenvolvimento de novas tecnologias associadas, por exemplo, à transmissão de informação.

Apesar do grande progresso experimental e teórico recentes nesta área, há ainda muitas questões em aberto uma vez que, conforme mencionamos no **Capítulo 1**, não existe um formalismo unificado que nos permita descrever sistemas quânticos fora do equilíbrio de maneira precisa. Grande parte dos avanços teóricos feitos são baseados em teorias de resposta linear, tais como a fórmula de Kubo [67, 68] e o formalismo de Landauer-Büttiker [56–60], que relacionam grandezas de não-equilíbrio com flutuações de grandezas de equilíbrio.

Outras abordagens possíveis são aquelas que utilizam técnicas provenientes de sistemas quânticos abertos, tais como a equação de Langevin quântica e a equação mestra quântica, conforme já mencionado também no **Capítulo 1**. Tais técnicas consistem em modelar microscopicamente a interação sistema-reservatório e, então, traçar os graus de liberdade do reservatório através de aproximações adequadas. Na primeira abordagem, os reservatórios térmicos são usualmente modelados a partir de um conjunto infinito de oscilares harmônicos quânticos mantidos em equilíbrio térmico a temperaturas distintas (modelo de Caldeira-Leggett [7, 8]). Alguns trabalhos utilizam essa abordagem para estudar, por exemplo, o fluxo de calor no estado

estado estacionário através de cadeias harmônicas cujas extremidades estão em contato com dois reservatórios térmicos [69–72], analogamente aos modelos clássicos discutidos na **Parte I** desta tese. O hamiltoniano típico para tal modelo é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^L \left[\frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{\kappa_n x_n^2}{2} \right] + \frac{k}{2} \sum_{n=1}^{L-1} (x_{n+1} - x_n)^2 + \sum_{\ell} \left[\frac{p_{\ell}^2}{2m_{\ell}} + \frac{m_{\ell} \omega_{\ell}^2}{2} \left(x_{\ell} - \frac{\gamma_{\ell} x_1}{m_{\ell} \omega_{\ell}^2} \right)^2 \right] + \sum_r \left[\frac{p_r^2}{2m_r} + \frac{m_r \omega_r^2}{2} \left(x_r - \frac{\gamma_r x_L}{m_r \omega_r^2} \right)^2 \right], \quad (6.1)$$

sendo $\{m_n, x_n, p_n, \kappa_n, k\}$ grandezas associadas aos graus de liberdade da cadeia de osciladores e $\{m_{\ell}, x_{\ell}, p_{\ell}, \omega_{\ell}\}$ e $\{m_r, x_r, p_r, \omega_r\}$, associadas aos reservatórios conectados às extremidades esquerda e direita da cadeia, respectivamente. As constantes γ_{ℓ} e γ_r referem-se ao acoplamento das extremidades da cadeia com os seus respectivos reservatórios. A partir das equações de movimento e de aproximações apropriadas, é possível obter um conjunto de equações de Langevin generalizadas em que, no estado estacionário, os reservatórios atuam efetivamente produzindo ruídos estocásticos $\xi_{\ell,r}(t)$ no sistema, tal que

$$\frac{1}{2} \langle \{ \xi_{\ell,r}(t), \xi_{\ell,r}(t') \} \rangle = \frac{\gamma_{\ell,r} \hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T_{\ell,r}} \right) e^{i\omega(t-t')}, \quad (6.2)$$

sendo $\hbar$ a constante de Planck e $\{A, B\} = AB + BA$ o anticomutador entre os operadores A e B . É interessante notar que no limite clássico ($\hbar \rightarrow 0$) o ruído anterior tende ao ruído clássico, conforme as expressões (3.8) e (3.18), uma vez que

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \left[\hbar \omega \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T_{\ell,r}} \right) \right] = 2k_B T_{\ell,r} \quad (6.3)$$

e

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega(t-t')} = \delta(t-t'). \quad (6.4)$$

A partir da solução do conjunto de equações de Langevin para as covariâncias entre as variáveis dinâmicas do sistema é possível, portanto, obter o fluxo de calor através da cadeia. Entretanto, apesar de factível para este modelo em particular, tal abordagem pode ser inviável para sistemas mais complexos.

A segunda abordagem consiste em uma forma alternativa e frequentemente utilizada para se estudar fenômenos de transporte em sistemas quânticos fora do equilíbrio: as equações mestras

na forma de Lindblad [4–6] dadas, de maneira geral, por

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] + \mathcal{D}(\rho), \quad (6.5)$$

com

$$\mathcal{D}(\rho) = \sum_{\ell} \left[L_{\ell} \rho L_{\ell}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{ L_{\ell}^{\dagger} L_{\ell}, \rho \} \right], \quad (6.6)$$

sendo ρ o operador densidade do sistema e $\mathcal{H}$ o seu hamiltoniano. O parâmetro γ representa a intensidade do acoplamento do sistema com o reservatório. Nessa abordagem, a interação entre o sistema e o reservatório é dada por operadores L_j (operadores de Lindblad) que constituem, na equação mestra, o dissipador de Lindblad $\mathcal{D}(\rho)$. Tais dissipadores são, em geral, implementados apenas para uma parte específica do sistema. Essa ideia está representada na Figura 6.1a, que ilustra uma cadeia de partículas acoplada a dois reservatórios mantidos a diferentes temperaturas e/ou potenciais químicos. Os reservatórios são, então, modelados por dissipadores de Lindblad escolhidos de maneira a termalizarem *localmente*¹ os sítios em que atuam, sem considerar o restante da cadeia. Recentemente, diversos trabalhos tem sido feitos utilizando tal método para se estudar fenômenos de transporte em sistemas quânticos abertos [73–93]. O caso de uma

Figura 6.1: Esquema ilustrando os reservatórios atuando em múltiplos sítios. Cada reservatório é caracterizado por uma temperatura T e um potencial químico μ . (a) Cadeia conectada com dois reservatórios atuando em um único sítio em cada extremidade. (b) Cadeia conectada com dois reservatórios atuando em múltiplos sítios em cada extremidade. (c) Reservatórios atuando precisamente em cada uma das metades da cadeia.

¹Tais dissipadores são chamados de *fenomenológicos*, pois não derivam de um modelo microscópico para a interação entre o sistema e o reservatório.

cadeia de osciladores harmônicos acoplados, por exemplo, foi estudado, por Asadian *et al.* [94], que consideraram um modelo descrito pelo hamiltoniano² ($\hbar = k_B = 1$)

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \omega a_j^\dagger a_j + \sum_{j=1}^{N-1} V(a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j), \quad (6.7)$$

sendo ω as frequências dos osciladores harmônicos, V a interação entre osciladores vizinhos e $a_j^\dagger$ (a_j) operadores usuais de criação (aniquilação) de fônons. A equação mestra utilizada para descrever a dinâmica do modelo é dada por

$$\frac{d\rho}{dt} = -i [\mathcal{H}, \rho] + \mathcal{D}_1(\rho) + \mathcal{D}_N(\rho), \quad (6.8)$$

tal que os dissipadores de Lindblad são dados por

$$\mathcal{D}_j(\rho) = \gamma_j(\bar{n}_j + 1) \left(a_j \rho a_j^\dagger - \frac{1}{2} \{a_j^\dagger a_j, \rho\} \right) + \gamma_j \bar{n}_j \left(a_j^\dagger \rho a_j - \frac{1}{2} \{a_j a_j^\dagger, \rho\} \right), \quad j = \{1, N\}, \quad (6.9)$$

sendo ρ o operador densidade do sistema, γ_j o acoplamento entre o j -ésimo sítio e o reservatório e $\bar{n}_j = (\exp(\omega/T_j) - 1)^{-1}$ o número médio de excitações de um oscilador acoplado ao j -ésimo reservatório de temperatura T_j . Comparando-se o dissipador acima com a definição (6.6), identificamos os operadores de Lindblad

$$L_j^- = \sqrt{\gamma_j(\bar{n}_j + 1)} a_j, \quad L_j^+ = \sqrt{\gamma_j \bar{n}_j} a_j^\dagger, \quad j = \{1, N\}. \quad (6.10)$$

É importante mencionarmos que a escolha dos operadores de Lindblad (6.10) ou, equivalentemente, do dissipador (6.9) para representar a interação do sistema com os reservatórios através dos sítios localizados nas extremidades da cadeia, *não* conduz o sistema para o estado correto de equilíbrio (estado de Gibbs) quando as temperaturas dos reservatórios são iguais. Em outras palavras, o estado

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{Tr}\{e^{-\beta \mathcal{H}}\}}, \quad \beta = 1/T, \quad (6.11)$$

sendo $\mathcal{H}$ dado pela expressão (6.7) e $T_1 = T_N \equiv T$, não é solução estacionária da equação (6.8), ou seja, $\mathcal{D}_1(\rho_{\text{eq}}) = \mathcal{D}_N(\rho_{\text{eq}}) \neq 0$ ³. Isso porque, conforme mencionamos anteriormente, tais dissipadores foram construídos de forma a termalizarem localmente o sítio em que atuam. Neste caso, cada dissipador termaliza corretamente apenas o primeiro e último sítio da cadeia, que correspondem, isoladamente, a um único oscilador harmônico de frequência ω . De fato,

²Os termos $a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger$ e $a_j a_{j+1}$ foram desprezados através da aproximação de ondas girantes [95].

³Considerando $\gamma_1 = \gamma_N \equiv \gamma$.

é possível verificar que $\mathcal{D}_j(\rho_0) = 0$, sendo $\rho_0 \sim \exp\{-\beta_j \omega a_j^\dagger a_j\}$. Para que os dissipadores forneçam o estado de equilíbrio correto, seria necessária uma derivação microscópica dos operadores de Lindblad, o que envolveria, conforme já mencionamos, um modelo para a interação sistema-reservatório e que, dependendo da complexidade do sistema em questão, pode se tornar inviável⁴.

Neste trabalho, nós consideramos o caso dos reservatórios atuando em múltiplos sítios, conforme mostra a **Figura 6.1b**. Diferente do caso anterior, os reservatórios agora atuam em grupos de partículas em cada extremidade da cadeia, de maneira a termalizarem corretamente esse grupo, independentemente do restante do sistema. Alguns trabalhos nessa linha, baseados em simulações numéricas, já foram realizados anteriormente, porém, considerando-se apenas duas partículas em cada extremidade da cadeia sobre as quais os reservatórios atuam [77, 86]. Nosso objetivo, portanto, é estudar um modelo que seja analiticamente tratável e ao mesmo tempo permita uma generalização para um número arbitrário de partículas sobre as quais os reservatórios atuam, incluindo o limite termodinâmico. Para tanto, utilizamos uma cadeia de *spins* do tipo *XX* [97], ou equivalentemente, o modelo de *tight-binding*, que descreve o *hopping* de elétrons em uma rede. Esse modelo foi escolhido pois, dada sua natureza quadrática, é possível implementar o esquema de reservatórios atuando em múltiplos sítios para tamanhos arbitrários do sistema através do acoplamento dos operadores de Lindblad diretamente aos modos normais da cadeia, que podem ser obtidos analítica e exatamente através da diagonalização do hamiltoniano do modelo.

Esse esquema nos permite obter não só o estado estacionário de não-equilíbrio correto do sistema, mas também taxas de termalização corretas, de maneira que, no equilíbrio, o estado do sistema é dado pelo estado de Gibbs. Conforme mostraremos nos capítulos seguintes, apesar da simplicidade do modelo, seu estado estacionário de não-equilíbrio apresenta uma estrutura muito mais sofisticada em relação àquele obtido em sistemas modelados através de reservatórios que atuam em um único sítio.

Uma consequência importante devido a dualidade entre a cadeia de *spins* do tipo *XX* e o modelo de *tight-binding* é que todos os resultados físicos obtidos tem duas interpretações complementares. No caso do modelo de *tight-binding*, o fluxo de partículas através do sistema devido ao gradiente de potencial químico é interpretado, por exemplo, como a corrente elétrica ao longo da cadeia. Conforme veremos nos capítulos a seguir, o esquema que implementamos recupera resultados importantes, tais como o transporte balístico de elétrons, que é comumente observado em dispositivos mesoscópicos [59]. Mostraremos também que, de fato, a corrente de partículas ao longo do sistema no estado estacionário pode ser escrita como uma fórmula de

⁴Recentemente, J. P. Santos e G. T. Landi [96] obtiveram uma equação mestra na forma de Lindblad derivada microscopicamente para esse modelo.

Landauer [56]. Além disso, uma vez que temos o controle dos gradientes, tanto de temperatura quanto de potencial químico, podemos estudar efeitos termoelétricos (como por exemplo o efeito Peltier-Seebeck) e obter fórmulas exatas para os coeficientes de Onsager [13].

Caso o sistema seja interpretado como uma cadeia de *spins* do tipo XX , então o fluxo de partículas se torna um fluxo de mágnons. Tal situação se assemelha aos experimentos descritos na referência [64], em que um fluxo de mágnons é gerado em cristais do tipo YIG. Nestes experimentos, mágnons são geralmente injetados no sistema através de um campo magnético local dependente do tempo produzido por uma antena de microfita. Estes mágnons são convertidos parametricamente devido a processos de interação no interior do sistema. O resultado, conforme discutido na referência [98], é que a antena de microfita atua efetivamente como um potencial químico para mágnons.

Capítulo 7

A Cadeia XX

Neste capítulo apresentaremos em detalhes as características essenciais da cadeia de *spins* do tipo XX , que estudaremos nesta segunda parte da tese. Introduziremos seu hamiltoniano e apresentaremos sua diagonalização exata em termos de operadores fermiônicos através da transformação de Jordan-Wigner, além de verificarmos sua transição de fase quântica.

A cadeia XX está associada a sistemas antiferromagnéticos unidimensionais, tais como Cs_2CoCl_4 [99]. Sob o ponto de vista teórico, trata-se de um modelo bastante interessante pois pode ser tratado analiticamente sem a utilização do *ansatz* de Bethe [100], além de possuir uma transição de fase quântica, o que nos fornece informações extremamente relevantes para a caracterização das propriedades de sistemas quânticos magnéticos de baixa dimensionalidade.

O hamiltoniano característico da cadeia XX é dado por

$$\mathcal{H}_{XX} = -\frac{h}{2} \sum_{\ell=1}^L \sigma_{\ell}^z - \frac{t}{2} \sum_{\ell=1}^{L-1} (\sigma_{\ell}^x \sigma_{\ell+1}^x + \sigma_{\ell}^y \sigma_{\ell+1}^y), \quad (7.1)$$

onde σ_{ℓ}^{α} , com $\alpha = \{x, y, z\}$ são as matrizes de Pauli usuais. Aqui, h representa o campo magnético externo e t representa a constante de interação entre *spins* vizinhos. A partir do hamiltoniano (7.1) notamos que a interação entre os *spins* nas direções x e y é isotrópica, e não há interação na direção z , o que caracteriza, portanto, o nome do modelo.

Uma forma mais conveniente de apresentarmos o hamiltoniano do modelo XX é através dos operadores de “abaixamento” e “levantamento”, respectivamente

$$\sigma_{\ell}^{-} = \frac{1}{2} (\sigma_{\ell}^x - i\sigma_{\ell}^y), \quad (7.2a)$$

$$\sigma_{\ell}^{+} = \frac{1}{2} (\sigma_{\ell}^x + i\sigma_{\ell}^y), \quad (7.2b)$$

de maneira que $\sigma_\ell^x = \sigma_\ell^+ + \sigma_\ell^-$ e $i\sigma_\ell^y = \sigma_\ell^+ - \sigma_\ell^-$. Assim, o hamiltoniano (7.1) pode ser reescrito como

$$\mathcal{H}_{XX} = -h \sum_{\ell=1}^L \left(\sigma_\ell^+ \sigma_\ell^- - \frac{1}{2} \right) - t \sum_{\ell=1}^{L-1} \left(\sigma_\ell^+ \sigma_{\ell+1}^- + \sigma_\ell^- \sigma_{\ell+1}^+ \right), \quad (7.3)$$

onde usamos a propriedade $[\sigma_\ell^+, \sigma_\ell^-] = \sigma_\ell^z$ e também a relação de completeza $\sigma_\ell^+ \sigma_\ell^- + \sigma_\ell^- \sigma_\ell^+ = 1$. Notamos que no primeiro termo da expressão acima está presente um termo constante que vale $hL/2$. Esse termo representa apenas um deslocamento na energia total do sistema, de forma que podemos, sem perda de generalidade, desprezá-lo. A seguir, vamos apresentar a diagonalização exata do hamiltoniano (7.3), resultado este que nos será útil mais adiante no desenvolvimento da dinâmica do sistema.

7.1 Diagonalização Exata

A diagonalização do hamiltoniano (7.3) é feita essencialmente em duas etapas. Na primeira, utilizamos a *transformação de Jordan-Wigner* [97] para reescrevê-lo em termos de operadores de criação e aniquilação de férmions. Em seguida, na segunda etapa, tomamos a transformada de Fourier do hamiltoniano nesta nova representação para trabalharmos no espaço dos momentos (rede recíproca), no qual estará diagonalizado. Descreveremos adiante cada uma dessas etapas em detalhes.

Transformação de Jordan-Wigner

Como havíamos mencionado, o primeiro passo para a diagonalização do hamiltoniano (7.3) é reescrevê-lo em termos de novos pares de operadores fermiônicos de aniquilação e criação η_ℓ e $\eta_\ell^\dagger$, respectivamente. Esses operadores satisfazem as relações de *anticomutação* usuais:

$$\{\eta_i, \eta_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{\eta_i, \eta_j\} = \{\eta_i^\dagger, \eta_j^\dagger\} = 0. \quad (7.4)$$

Assim, diferentemente do que ocorre com os operadores de spin σ_i^- e σ_j^+ que comutam para sítios distintos, de forma que $\sigma_i^- \sigma_j^+ = \sigma_j^+ \sigma_i^-$, os operadores fermiônicos ganham uma fase quando permutados entre si, ou seja, $\eta_i^\dagger \eta_j = -\eta_j \eta_i^\dagger$ (o mesmo vale para $\eta_i \eta_j$ e $\eta_i^\dagger \eta_j^\dagger$). Ressaltamos por fim que, pelo princípio de exclusão de Pauli, o operador número $n_\ell = \eta_\ell^\dagger \eta_\ell$ pode assumir apenas os valores 0 e 1, uma vez que não podemos ter dois ou mais férmions ocupando o mesmo estado quântico.

Para passarmos o hamiltoniano (7.3) da representação de operadores de spin para os operadores fermiônicos supracitados, utilizamos a chamada transformação de Jordan-Wigner,

7.1. Diagonalização Exata

que relaciona os operadores η_ℓ e $\eta_\ell^\dagger$ aos operadores de spin σ_ℓ^- e σ_ℓ^+ através das transformações

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \sigma_1^-, \quad \eta_1^\dagger = \sigma_1^+, \\ \eta_\ell &= Q_\ell \sigma_\ell^-, \quad \eta_\ell^\dagger = Q_\ell \sigma_\ell^+, \quad Q_\ell = \left[\prod_{j=1}^{\ell-1} (-\sigma_j^z) \right], \quad \ell \geq 2. \end{aligned} \quad (7.5)$$

É imediato verificar que o operador Q_ℓ satisfaz as seguintes propriedades:

$$[Q_\ell, \sigma_m^\pm] = 0, m \geq \ell \quad \text{e} \quad Q_\ell^2 = 1. \quad (7.6)$$

Além disso, é interessante notar que, para $m > \ell$

$$\begin{aligned} Q_m Q_\ell &= \left[\prod_{j=1}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] \left[\prod_{j=1}^{\ell-1} (-\sigma_j^z) \right], \\ &= \left[\prod_{j=1}^{\ell-1} (-\sigma_j^z) \right] \left[\prod_{j=\ell}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] \left[\prod_{j=1}^{\ell-1} (-\sigma_j^z) \right], \\ &= Q_\ell \left[\prod_{j=\ell}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] Q_\ell, \\ &= Q_\ell^2 \left[\prod_{j=\ell}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right], \\ Q_m Q_\ell &= \left[\prod_{j=\ell}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] = Q_\ell Q_m. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Com as propriedades (7.6) e (7.7), podemos facilmente mostrar que os operadores fermiônicos definidos em (7.5) satisfazem as relações de anticomutação (7.4). Vamos demonstrar a primeira relação $\{\eta_\ell, \eta_m^\dagger\} = \eta_\ell \eta_m^\dagger + \eta_m^\dagger \eta_\ell = \delta_{\ell m}$. As demais são demonstradas de maneira análoga.

$$\{\eta_\ell, \eta_m^\dagger\} = \eta_\ell \eta_m^\dagger + \eta_m^\dagger \eta_\ell = Q_\ell \sigma_\ell^- Q_m \sigma_m^+ + Q_m \sigma_m^+ Q_\ell \sigma_\ell^-. \quad (7.8)$$

Para $\ell = m$, usamos as propriedades descritas em (7.6), de forma que a equação acima torna-se

$$\begin{aligned} \eta_\ell \eta_\ell^\dagger + \eta_\ell^\dagger \eta_\ell &= Q_\ell^2 \sigma_\ell^- \sigma_\ell^+ + \sigma_\ell^+ \sigma_\ell^- Q_\ell^2, \\ &= \sigma_\ell^- \sigma_\ell^+ + \sigma_\ell^+ \sigma_\ell^-, \\ \therefore \eta_\ell \eta_\ell^\dagger + \eta_\ell^\dagger \eta_\ell &= 1. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Para $\ell \neq m$ (supondo também $m > \ell$), nos valem da propriedade (7.7), de forma que

$$\begin{aligned}
 \eta_\ell \eta_m^\dagger + \eta_m^\dagger \eta_\ell &= Q_\ell \sigma_\ell^- Q_m \sigma_m^+ + Q_m \sigma_m^+ Q_\ell \sigma_\ell^-, \\
 &= \sigma_\ell^- \sigma_m^+ Q_\ell Q_m + Q_m Q_\ell \sigma_m^+ \sigma_\ell^-, \\
 &= \sigma_\ell^- \sigma_m^+ \left[\prod_{j=\ell}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] + \left[\prod_{j=\ell}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] \sigma_\ell^- \sigma_m^+, \\
 &= -\sigma_\ell^- \sigma_\ell^z \sigma_m^+ \left[\prod_{j=\ell+1}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] - \left[\prod_{j=\ell+1}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] \sigma_\ell^z \sigma_\ell^- \sigma_m^+, \\
 &= -\sigma_\ell^- \sigma_m^+ \left[\prod_{j=\ell+1}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] + \sigma_\ell^- \sigma_m^+ \left[\prod_{j=\ell+1}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right], \\
 &= \left[\prod_{j=\ell+1}^{m-1} (-\sigma_j^z) \right] [\sigma_m^+, \sigma_\ell^-], \\
 \therefore \eta_\ell \eta_m^\dagger + \eta_m^\dagger \eta_\ell &= 0.
 \end{aligned} \tag{7.10}$$

Uma vez que verificamos a relação de anticomutação entre os operadores η_ℓ e $\eta_m^\dagger$, vamos agora reescrever o hamiltoniano (7.3) em termos desses operadores. Para tanto, usamos a propriedade (7.7) para escrever

$$Q_\ell Q_{\ell+1} = -\sigma_\ell^z. \tag{7.11}$$

Com isso, calculamos os seguintes termos:

$$\begin{aligned}
 \eta_\ell^\dagger \eta_{\ell+1} &= Q_\ell \sigma_\ell^+ Q_{\ell+1} \sigma_{\ell+1}^-, \\
 &= \sigma_\ell^+ \sigma_{\ell+1}^- Q_\ell Q_{\ell+1}, \\
 &= -\sigma_\ell^+ \sigma_\ell^z \sigma_{\ell+1}^-, \\
 \therefore \eta_\ell^\dagger \eta_{\ell+1} &= \sigma_\ell^+ \sigma_{\ell+1}^-.
 \end{aligned} \tag{7.12}$$

Tomando-se o conjugado transposto da expressão acima obtemos

$$\begin{aligned}
 (\eta_\ell^\dagger \eta_{\ell+1})^\dagger &= (\sigma_\ell^+ \sigma_{\ell+1}^-)^\dagger, \\
 \eta_{\ell+1}^\dagger \eta_\ell &= \sigma_{\ell+1}^+ \sigma_\ell^-, \\
 \therefore \eta_{\ell+1}^\dagger \eta_\ell &= \sigma_\ell^- \sigma_{\ell+1}^+,
 \end{aligned} \tag{7.13}$$

onde na última linha usamos a comutação dos operadores $\sigma_\ell^\pm$ para diferentes sítios. Por fim,

7.1. Diagonalização Exata

temos

$$\begin{aligned}\eta_\ell^\dagger \eta_\ell &= Q_\ell \sigma_\ell^+ Q_\ell \sigma_\ell^-, \\ &= Q_\ell^2 \sigma_\ell^+ \sigma_\ell^-, \\ \therefore \eta_\ell^\dagger \eta_\ell &= \sigma_\ell^+ \sigma_\ell^-. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Desta forma, usando os resultados (7.12), (7.13) e (7.14) para reescrever o hamiltoniano (7.3), obtemos

$$\mathcal{H}_{XX} = -h \sum_{\ell=1}^L \eta_\ell^\dagger \eta_\ell - t \sum_{\ell=1}^{L-1} (\eta_{\ell+1}^\dagger \eta_\ell + \eta_\ell^\dagger \eta_{\ell+1}), \quad (7.15)$$

onde desprezamos o termo constante $hL/2$. O hamiltoniano (7.15) corresponde, portanto, à representação fermiônica da cadeia XX . Este hamiltoniano também coincide exatamente com o hamiltoniano de *tight-binding*, que descreve o tunelamento de elétrons através de uma rede. Nesse caso, t representa uma amplitude de probabilidade para que um elétron tunele para um sítio vizinho, enquanto h representa a energia local (*on-site*) do elétron. A magnetização σ_ℓ^z e o número de ocupação $n_\ell = \eta_\ell^\dagger \eta_\ell$ estão relacionados por $\sigma_\ell^z = (2n_\ell - 1)$. Assim, um sítio ocupado ($n_\ell = 1$) é interpretado como um estado magnetizado na direção $+z$, enquanto um sítio desocupado ($n_\ell = 0$) representa um estado magnetizado na direção $-z$.

O hamiltoniano (7.15) pode ser facilmente diagonalizado através de sua transformada de Fourier, conforme mostraremos a seguir.

Transformada de Fourier

Uma vez obtida a representação fermiônica do hamiltoniano da cadeia XX dado na equação (7.15), a próxima etapa para sua diagonalização consiste em tomarmos sua transformada de Fourier, ou seja, vamos passar de sua representação no espaço real para a representação no espaço de momentos. Uma forma particularmente simples de realizarmos tal procedimento consiste, primeiro, em notarmos que o hamiltoniano (7.15) é uma forma quadrática nos operadores fermiônicos η_ℓ , podendo ser escrito como

$$\mathcal{H}_{XX} = \sum_{i,j} W_{ij} \eta_i^\dagger \eta_j = \eta^\dagger W \eta, \quad (7.16)$$

Capítulo 7. A Cadeia XX

sendo W a matriz tridiagonal simétrica $L \times L$

$$W = \begin{pmatrix} -h & -t & & & \\ -t & -h & -t & & \\ & -t & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & -h & -t \\ & & & -t & -h \end{pmatrix}, \quad (7.17)$$

e $\eta = (\eta_1 \eta_2 \dots \eta_L)^T$ um vetor coluna contendo os operadores η_ℓ . Se S é a matriz de transformação que diagonaliza W , então podemos escrever

$$\tilde{W} = SW S^\dagger \Rightarrow W = S^\dagger \tilde{W} S, \quad (7.18)$$

sendo $\tilde{W}$ a forma diagonal de W . Substituindo então a expressão (7.18) na (7.16), obtemos

$$\mathcal{H}_{XX} = \sum_k \tilde{W}_{kk} \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k = \tilde{\eta}^\dagger \tilde{W} \tilde{\eta}, \quad (7.19)$$

onde $\tilde{\eta} = S\eta$ é um novo conjunto de operadores fermiônicos. Vemos assim, que o hamiltoniano (7.16) pode ser diagonalizado através da diagonalização da matriz W . As autoenergias de $\mathcal{H}_{XX}$ correspondem aos autovalores de W e a matriz de transformação S é formada por seus autovetores.

A diagonalização de W é feita partindo-se da equação de autovalores $W\mathbf{u} = \epsilon\mathbf{u}$, sendo $\mathbf{u} = (u_1 u_2 \dots u_L)^T$ um autovetor de W e ϵ seu respectivo autovalor. Com o auxílio da expressão (7.17), essa equação matricial pode ser escrita como um sistema de equações

$$-hu_\ell - t(u_{\ell-1} + u_{\ell+1}) = \epsilon u_\ell, \quad 1 \leq \ell \leq L \quad (7.20)$$

onde vamos considerar condições de contorno fixas¹ $u_0 = u_{L+1} = 0$. Vamos agora supor uma solução do tipo $u_\ell = Ae^{ik\ell} + Be^{-ik\ell}$, sendo A e B constantes. As condições de contorno nos fornecem

$$\begin{aligned} u_0 = 0 &\Rightarrow B = -A \therefore u_\ell = 2iA \sin(k\ell); \\ u_{L+1} = 0 &\Rightarrow 2iA \sin[k(L+1)] = 0 \therefore k = \frac{\pi}{L+1}, \dots, \frac{L\pi}{L+1}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Vemos aqui que os L autovetores de W são indexados, portanto, pelos valores de k . A constante

¹Tal escolha é conveniente pois queremos que a cadeia seja aberta para que posteriormente possamos incluir em suas extremidades o contato com reservatórios térmicos e de partículas.

7.1. Diagonalização Exata

A pode ser obtida pela normalização dos autovetores

$$\sum_{\ell=1}^L |u_{\ell}|^2 = 1 \Rightarrow 4|A|^2 \sum_{\ell=1}^L \sin^2(k\ell) = 1. \quad (7.22)$$

A série acima pode ser facilmente calculada se escrevermos o seno como uma exponencial complexa. Assim, a série se torna geométrica e pode ser calculada diretamente. Tal cálculo nos fornece $|A| = 1/\sqrt{2(L+1)}$. A fase complexa da normalização é arbitrária, de modo que podemos escolhê-la tal que a componente u_{ℓ} do k -ésimo autovetor dada na expressão (7.21) se torne

$$u_{\ell} = \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sin(k\ell). \quad (7.23)$$

Uma vez encontrados seus autovetores, os autovalores de W podem ser encontrados substituindo-se u_{ℓ} , dado na expressão (7.23), na equação (7.20), o que resulta em

$$-h \sin(k\ell) - t\{\sin[k(\ell-1)] + \sin[k(\ell+1)]\} = \epsilon_k \sin(k\ell). \quad (7.24)$$

Após o uso de algumas identidades trigonométricas, a equação (7.24) nos fornece

$$\epsilon_k = -h - 2t \cos k, \quad (7.25)$$

que corresponde aos L autovalores de W , indexados também por k . Por fim, a matriz de transformação S que diagonaliza W é construída de forma que sua k -ésima coluna corresponde ao k -ésimo autovetor u_{ℓ} , ou seja,

$$S_{\ell k} = \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sin(k\ell). \quad (7.26)$$

Notamos que, dada a ortogonalidade entre os autovetores u_{ℓ} , S é uma matriz ortogonal, ou seja, $SS^{\dagger} = S^{\dagger}S = 1$. De volta à expressão (7.19), concluimos então que o hamiltoniano diagonalizado da cadeia XX fica

$$\mathcal{H}_{XX} = \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_k^{\dagger} \tilde{\eta}_k, \quad k = \frac{\pi}{L+1}, \dots, \frac{L\pi}{L+1}, \quad (7.27)$$

onde $\tilde{W}_{kk} = \epsilon_k$ são as autoenergias e

$$\tilde{\eta}_k = \sum_{\ell=1}^L S_{\ell k} \eta_{\ell} = \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sum_{\ell=1}^L \sin(k\ell) \eta_{\ell}, \quad (7.28)$$

são os novos operadores fermiônicos indexados por k . É imediato verificar que tais operadores são de fato fermiônicos. Para tanto, usamos a ortogonalidade da matriz S para mostrar que tais operadores satisfazem as relações de anticomutação usuais dadas na expressão (7.4). A relação $\{\tilde{\eta}_k, \tilde{\eta}_{k'}^\dagger\}$, por exemplo, pode ser facilmente verificada

$$\begin{aligned}
 \{\tilde{\eta}_k, \tilde{\eta}_{k'}^\dagger\} &= \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_{k'}^\dagger + \tilde{\eta}_{k'}^\dagger \tilde{\eta}_k, \\
 &= \sum_{\ell} S_{\ell k} \eta_{\ell} \sum_{\ell'} S_{k' \ell'} \eta_{\ell'}^\dagger + \sum_{\ell'} S_{k' \ell'} \eta_{\ell'}^\dagger \sum_{\ell} S_{\ell k} \eta_{\ell}, \\
 &= \sum_{\ell \ell'} S_{k' \ell'} S_{\ell k} \underbrace{\{\eta_{\ell}, \eta_{\ell'}^\dagger\}}_{\delta_{\ell \ell'}}, \\
 &= \sum_{\ell} S_{k' \ell} S_{\ell k}, \\
 &= \delta_{kk'}.
 \end{aligned} \tag{7.29}$$

As demais relações podem ser verificadas de maneira análoga.

A partir da expressão (7.28) identificamos, portanto, que o novo conjunto de operadores fermiônicos $\tilde{\eta}_k$ corresponde simplesmente à transformada de Fourier em seno dos operadores η_{ℓ} , de pseudomomento k . O fato da transformada ser em seno se deve justamente por termos considerado condições fixas de contorno.

Encerramos, então, a discussão sobre a diagonalização do hamiltoniano da cadeia XX. A seguir, apresentaremos brevemente uma descrição sobre sua transição de fase quântica.

7.2 Transição de Fase Quântica

Uma das propriedades mais interessantes referentes ao modelo XX é a presença de uma transição de fase quântica [101], que pode ser identificada a partir da relação de dispersão ϵ_k , dada na expressão (7.25), onde devemos considerar três casos distintos: $|h| \leq 2t$, $h \leq -2t$ e $h \geq 2t$, conforme ilustrado na Figura 7.1. No caso $h \leq -2t$, a energia de todos os férmions é positiva e o estado fundamental está completamente vazio, o que caracteriza, conforme mencionamos na seção anterior, o sistema completamente magnetizado na direção $-z$. Já no caso $h \geq 2t$, a energia de todos os férmions é negativa e todos os estados fermiônicos estão ocupados, o que é interpretado como o sistema magnetizado na direção $+z$. Já para valores intermediários de h , a ocupação dos estados é parcial. Esse caso é equivalentemente interpretado como sendo uma magnetização parcial do sistema, que pode assumir valores entre -1 e 1 .

Para calcularmos a magnetização do sistema devemos primeiro obter os valores do momento de Fermi k_F a partir da condição $\epsilon_k = 0$, o que nos leva, para cada um dos três casos mencionados

7.2. Transição de Fase Quântica

Figura 7.1: Relação de dispersão ϵ_k em função de k para três regimes distintos do campo magnético h . A primeira zona de Brillouin neste caso corresponde ao intervalo $[0, \pi]$.

acima, a

$$k_F = \begin{cases} 0, & h \leq -2t, \\ \pi - \arccos\left(\frac{h}{2t}\right), & |h| \leq 2t, \\ \pi, & h \geq 2t, \end{cases} \quad (7.30)$$

onde usamos a identidade $\arccos(-x) = \pi - \arccos(x)$. A ocupação dos estados de pseudomomento k ficam, portanto,

$$\begin{aligned} \tilde{n}_k &= 0, & k \in [k_F, \pi], \\ \tilde{n}_k &= 1, & k \in [0, k_F], \end{aligned} \quad (7.31)$$

onde $\tilde{n}_k = \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k$. A magnetização média (por sítio) m à temperatura zero pode ser calculada usando-se a relação $\sigma_\ell^z = 2\eta_\ell^\dagger \eta_\ell - 1$, de forma que

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L \sigma_\ell^z, \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L (2\eta_\ell^\dagger \eta_\ell - 1), \\ &= \frac{2}{L} \sum_{\ell=1}^L \eta_\ell^\dagger \eta_\ell - 1. \end{aligned} \quad (7.32)$$

A soma na terceira linha da equação anterior pode ser obtida com o auxílio da expressão (7.28),

que nos fornece

$$\begin{aligned}
 \sum_k \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k &= \sum_k \sum_{\ell, \ell'} S_{k\ell} S_{\ell'k} \eta_\ell^\dagger \eta_{\ell'}, \\
 &= \sum_{\ell, \ell'} \sum_k S_{\ell'k} S_{k\ell} \eta_\ell^\dagger \eta_{\ell'}, \\
 &= \sum_{\ell \ell'} \delta_{\ell \ell'} \eta_\ell^\dagger \eta_{\ell'}, \\
 \therefore \sum_k \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k &= \sum_\ell \eta_\ell^\dagger \eta_\ell.
 \end{aligned} \tag{7.33}$$

Assim, substituindo o resultado anterior na última linha da expressão (7.32) e usando novamente a definição $\tilde{n}_k = \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k$, obtemos

$$m = \frac{2}{L} \sum_k \tilde{n}_k - 1. \tag{7.34}$$

Usando, por fim, os valores de $\tilde{n}_k$ dados em (7.31), temos

$$\begin{aligned}
 m &= \frac{2}{L} \left[\sum_{k=0}^{k_F} 1 + \sum_{k=k_F}^{\pi} 0 \right] - 1, \\
 \therefore m &= \frac{2}{L} \sum_{k=0}^{k_F} 1 - 1.
 \end{aligned} \tag{7.35}$$

A soma na expressão (7.35) pode ser calculada mais facilmente se tomarmos o limite termodinâmico, ou seja, $L \rightarrow \infty$. Isso pode ser feito usando-se a regra padrão para conversão de somas em integrais na primeira zona de Brillouin:

$$\begin{aligned}
 \sum_k f_k &= \sum_k f_k \Delta k \frac{1}{\Delta k}, \\
 &\simeq \frac{L}{\pi} \sum_k f_k \Delta k, \\
 \therefore \sum_k f_k &\rightarrow \frac{L}{\pi} \int f(k) dk,
 \end{aligned} \tag{7.36}$$

onde usamos os valores de k dados em (7.27) para obter $\Delta k = \pi/L+1 \simeq \pi/L$ no limite termodinâmico e $k \in [0, \pi]$. Usando a conversão acima na expressão (7.35), temos

$$m = \frac{2}{\pi} \int_0^{k_F} dk - 1 = \frac{2k_F}{\pi} - 1. \tag{7.37}$$

Substituindo, por fim, os valores do momento de Fermi dados na expressão (7.30) na magneti-

7.2. Transição de Fase Quântica

zação acima, obtemos finalmente

$$m = \begin{cases} -1, & h \leq -2t, \\ 1 - \frac{2}{\pi} \arccos\left(\frac{h}{2t}\right), & |h| \leq 2t, \\ 1, & h \geq 2t. \end{cases} \quad (7.38)$$

A **Figura 7.2a** ilustra a magnetização do modelo XX dada na expressão (7.38). Como é possível

Figura 7.2: Magnetização (a) e susceptibilidade magnética (b) da cadeia XX à temperatura zero como função do campo magnético externo h . A transição de fase quântica é verificada nos pontos críticos $h/2t = \pm 1$. As descontinuidades da susceptibilidade nos pontos críticos indicam uma transição de fase de segunda ordem.

observar, o sistema apresenta de fato uma transição de fase nos pontos críticos $h/2t = \pm 1$ que separam três fases distintas: sistema completamente magnetizado na direção $-z$ ($h/2t < -1$), sistema completamente magnetizado na direção $+z$ ($h/2t > 1$) e magnetização intermediária ($|h|/2t < 1$).

Para analisarmos a ordem da transição de fase do modelo XX , devemos analisar a derivada da magnetização em relação ao campo magnético externo h , ou seja, a susceptibilidade magnética, que é dada por

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \begin{cases} 0, & h \leq -2t, \\ \frac{1}{\pi t} \left[1 - \left(\frac{h}{2t} \right)^2 \right]^{-1/2}, & |h| \leq 2t, \\ 0, & h \geq 2t. \end{cases} \quad (7.39)$$

A **Figura 7.2b** mostra a susceptibilidade magnética como função do campo magnético externo h . É possível observar claramente que há descontinuidades nos pontos críticos $h/2t = \pm 1$, o que classifica esta transição de fase como sendo de segunda ordem.

A partir das expressões (7.38) e (7.39), podemos analisar o comportamento da magnetização e da susceptibilidade magnética próximos aos pontos críticos. Para a magnetização, fazemos

Capítulo 7. A Cadeia XX

sua expansão em torno dos pontos $h/2t = \pm 1$, de forma que obtemos

$$m - m_c \simeq \begin{cases} \frac{2\sqrt{2}}{\pi} (h - h_c)^{1/2}, & h_c/2t = -1, m_c = -1, \\ -\frac{2\sqrt{2}}{\pi} (h_c - h)^{1/2}, & h_c/2t = +1, m_c = +1, \end{cases} \quad (7.40)$$

que corresponde a uma lei de potência. O expoente crítico que descreve o comportamento do parâmetro de ordem em função de um campo externo é geralmente denotado por δ . No caso de sistemas magnéticos temos $m - m_c \sim (h - h_c)^{1/\delta}$, que comparada à expressão (7.40) nos fornece $\delta = 2$. Já o expoente crítico que descreve a singularidade da susceptibilidade magnética nos pontos críticos é tal que $\chi \sim (h - h_c)^{-\gamma}$, que comparada à expressão (7.39) nos fornece $\gamma = 1/2$.

Encerramos portanto a discussão sobre o modelo XX . Nos capítulos seguintes faremos o desenvolvimento da dinâmica do sistema que utilizaremos para modelar o contato das extremidades da cadeia com reservatórios térmicos e de partículas.

Capítulo 8

Dinâmica de Lindblad

Vimos brevemente no [Capítulo 6](#) que uma das formas frequentemente utilizadas para se descrever a dinâmica de um sistema quântico acoplado a um reservatório térmico é através da equação mestra de Lindblad [4], conforme as equações (6.5) e (6.6). Vimos também, um exemplo de equação mestra de Lindblad para uma cadeia de osciladores harmônicos acoplados cujas extremidades estão em contato com reservatórios mantidos a diferentes temperaturas. Entretanto, não apresentamos nenhum detalhe ou propriedade sobre este tipo de dinâmica e como ela pode ser derivada. Por essas razões, apresentaremos neste capítulo detalhes da dinâmica de Lindblad, estabelecendo suas propriedades e características gerais mais relevantes. Mostraremos alguns exemplos típicos de equações mestras para alguns sistemas quânticos bem conhecidos na literatura e suas propriedades. Por fim, descreveremos a dinâmica de Lindblad atuando em múltiplos sítios que será empregada no restante deste trabalho.

8.1 Dinâmica Dissipativa

Conforme vimos anteriormente, quando um sistema está em contato com um reservatório térmico, sua dinâmica deixa de ser unitária e passa a ser descrita pela equação mestra (6.5)

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] + \mathcal{D}(\rho), \quad (8.1)$$

sendo $\mathcal{D}(\rho)$ um operador conhecido como dissipador, cuja função é descrever o contato com o reservatório térmico.

O primeiro desafio ao se utilizar equações mestras quânticas do tipo (8.1) reside em como derivar uma fórmula explícita para o dissipador. Tal derivação depende essencialmente do hamiltoniano do sistema e de sua interação com o reservatório, de forma que, quaisquer

alterações no hamiltoniano do sistema implicam uma nova derivação para um novo dissipador.

A estrutura da equação (8.1) não nos dá nenhuma informação sobre a forma do dissipador $\mathcal{D}(\rho)$. Entretanto, existem algumas propriedades gerais que o dissipador deve satisfazer:

1. $\mathcal{D}(\rho)$ deve ser hermitiano, uma vez que ρ é hermitiano;
2. $\mathcal{D}(\rho)$ deve satisfazer $\text{Tr}\{\mathcal{D}(\rho)\} = 0$. Isso garante que

$$\begin{aligned} \text{Tr}\left\{\frac{d\rho}{dt}\right\} &= -\frac{i}{\hbar}\text{Tr}\{[\mathcal{H}, \rho]\} + \gamma\text{Tr}\{\mathcal{D}(\rho)\}, \\ \frac{d}{dt}\text{Tr}\{\rho\} &= 0, \\ \therefore \text{Tr}\{\rho\} &= \text{const.} \end{aligned} \tag{8.2}$$

ou seja, a normalização de ρ é conservada¹.

3. O estado de Gibbs $\rho_{\text{eq}} \propto e^{-\beta\mathcal{H}}$ deve ser a solução estacionária *única* da equação mestra (8.1). Uma vez que a parte unitária $[\mathcal{H}, e^{-\beta\mathcal{H}}] = 0$, o dissipador deve, portanto, satisfazer $\mathcal{D}(\rho) = 0$ somente para $\rho = \rho_{\text{eq}}$, garantindo que o estado de equilíbrio seja único.

Em 1976, Göran Lindblad propôs que a forma mais geral para um dissipador satisfazer tais propriedades é aquela dada na equação (6.6)

$$\mathcal{D}(\rho) = \gamma \sum_{\ell} \left[L_{\ell} \rho L_{\ell}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{L_{\ell}^{\dagger} L_{\ell}, \rho\} \right], \tag{8.3}$$

sendo L_{ℓ} os chamados operadores de Lindblad, derivados a partir da interação entre o sistema e o reservatório. A constante γ representa a intensidade do acoplamento do sistema ao reservatório, de forma que no limite em que $\gamma \rightarrow 0$, o sistema se torna completamente desacoplado do reservatório e sua dinâmica se torna novamente unitária. É possível verificarmos que o dissipador (8.3) satisfaz prontamente as duas primeiras propriedades listadas acima:

¹Dizemos, neste caso, que $\mathcal{D}$ é um mapa que preserva o traço (*trace preserving map*).

8.1. Dinâmica Dissipativa

1.

$$\begin{aligned}
 [\mathcal{D}(\rho)]^\dagger &= \gamma \sum_{\ell} \left[L_{\ell} \rho L_{\ell}^\dagger - \frac{1}{2} \{L_{\ell}^\dagger L_{\ell}, \rho\} \right]^\dagger, \\
 &= \gamma \sum_{\ell} \left[(L_{\ell} \rho L_{\ell}^\dagger)^\dagger - \frac{1}{2} (L_{\ell}^\dagger L_{\ell} \rho + \rho L_{\ell}^\dagger L_{\ell})^\dagger \right], \\
 &= \gamma \sum_{\ell} \left[(L_{\ell} \rho L_{\ell}^\dagger) - \frac{1}{2} (L_{\ell}^\dagger L_{\ell} \rho + \rho L_{\ell}^\dagger L_{\ell}) \right], \\
 \therefore [\mathcal{D}(\rho)]^\dagger &= \mathcal{D}(\rho);
 \end{aligned} \tag{8.4}$$

2. usando a linearidade do traço e sua propriedade cíclica, verificamos que

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}\{\mathcal{D}(\rho)\} &= \text{Tr} \left\{ \gamma \sum_{\ell} \left[L_{\ell} \rho L_{\ell}^\dagger - \frac{1}{2} \{L_{\ell}^\dagger L_{\ell}, \rho\} \right] \right\}, \\
 &= \gamma \sum_{\ell} \text{Tr} \left\{ L_{\ell} \rho L_{\ell}^\dagger - \frac{1}{2} (L_{\ell}^\dagger L_{\ell} \rho + \rho L_{\ell}^\dagger L_{\ell}) \right\}, \\
 &= \gamma \sum_{\ell} \text{Tr} \left\{ L_{\ell} \rho L_{\ell}^\dagger - \frac{1}{2} (L_{\ell} \rho L_{\ell}^\dagger + L_{\ell} \rho L_{\ell}^\dagger) \right\}, \\
 \therefore \text{Tr}\{\mathcal{D}(\rho)\} &= 0.
 \end{aligned} \tag{8.5}$$

A terceira propriedade não pode ser verificada diretamente pois está intrinsecamente associada à forma específica do hamiltoniano do sistema. Logo, para que possamos melhor analisar tal propriedade, é interessante mostrarmos explicitamente alguns dissipadores para sistemas mais simples, porém de grande relevância teórica.

8.1.1 Sistema de Dois Níveis

Um dos sistemas mais simples que podemos considerar como exemplo é o de um sistema que possui apenas dois níveis de energia, descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\Omega}{2} \sigma^z, \tag{8.6}$$

sendo $\hbar\Omega$ a separação entre os dois níveis de energia. Nesse caso, um possível dissipador que satisfaça as propriedades desejadas é dado por

$$\mathcal{D}(\rho) = \gamma \frac{1-f}{2} \left[\sigma^+ \rho \sigma^- - \frac{1}{2} (\sigma^- \sigma^+ \rho + \rho \sigma^- \sigma^+) \right] + \gamma \frac{1+f}{2} \left[\sigma^- \rho \sigma^+ - \frac{1}{2} (\sigma^+ \sigma^- \rho + \rho \sigma^+ \sigma^-) \right], \quad (8.7)$$

onde $f = \tanh(\beta\hbar\Omega/2)$. Comparando-se o dissipador (8.7) com a expressão (8.3), identificamos os operadores de Lindblad

$$L^- = \sqrt{\gamma \frac{1+f}{2}} \sigma^-, \quad L^+ = \sqrt{\gamma \frac{1-f}{2}} \sigma^+, \quad (8.8)$$

que representam a emissão e absorção de excitação entre o sistema de dois níveis e o reservatório, respectivamente. A equação mestra completa para o sistema fica, portanto,

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] + \gamma \frac{1-f}{2} \left[\sigma^+ \rho \sigma^- - \frac{1}{2} (\sigma^- \sigma^+ \rho + \rho \sigma^- \sigma^+) \right] + \gamma \frac{1+f}{2} \left[\sigma^- \rho \sigma^+ - \frac{1}{2} (\sigma^+ \sigma^- \rho + \rho \sigma^+ \sigma^-) \right]. \quad (8.9)$$

Uma forma mais objetiva de compreendermos como o dissipador (8.7) atua no sistema é escrever explicitamente as equações para as entradas do operador densidade:

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle + | \rho | + \rangle & \langle + | \rho | - \rangle \\ \langle - | \rho | + \rangle & \langle - | \rho | - \rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} P_+ & q \\ q^* & P_- \end{pmatrix}, \quad (8.10)$$

sendo $\{|-\rangle, |+\rangle\}$ autoestados do hamiltoniano (8.6). Pela normalização $\text{Tr}\{\rho\} = P_+ + P_- = 1$, concluímos que os elementos diagonais representam, então, as probabilidades de ocupação dos níveis de energia do sistema. Já o elemento fora da diagonal q , representa a fase relativa (ou coerência) entre os estados $|\pm\rangle$. É interessante mencionar que o sistema de dois níveis (conhecido também como *qubit*) é de extrema relevância no contexto de computação/informação quântica. Em particular, todo o processamento de informação se dá através da fase relativa q . E, conforme veremos logo adiante, tal fase é completamente “destruída” devido o contato do sistema com o ambiente (reservatório). A parte unitária da equação mestra (8.9) fornece

$$-\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] = -i\Omega \begin{pmatrix} 0 & q \\ -q^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.11)$$

8.1. Dinâmica Dissipativa

Já a parte dissipativa, resulta em

$$\begin{aligned}\sigma^+ \rho \sigma^- - \frac{1}{2}(\sigma^- \sigma^+ \rho + \rho \sigma^- \sigma^+) &= \begin{pmatrix} P_- & -q/2 \\ -q^*/2 & -P_- \end{pmatrix}, \\ \sigma^- \rho \sigma^+ - \frac{1}{2}(\sigma^+ \sigma^- \rho + \rho \sigma^+ \sigma^-) &= \begin{pmatrix} -P_+ & -q/2 \\ -q^*/2 & P_+ \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{8.12}$$

Substituindo a expressão (8.10) e os resultados (8.11) e (8.12) na equação mestra (8.9), obtemos

$$\frac{dP_+}{dt} = \gamma \left[\frac{(1-f)}{2} P_- - \frac{(1+f)}{2} P_+ \right] = \frac{\gamma}{2} (P_- - P_+) - \frac{\gamma f}{2}, \tag{8.13a}$$

$$\frac{dP_-}{dt} = \gamma \left[-\frac{(1-f)}{2} P_- + \frac{(1+f)}{2} P_+ \right] = \frac{\gamma}{2} (P_+ - P_-) + \frac{\gamma f}{2}, \tag{8.13b}$$

$$\frac{dq}{dt} = -i\Omega q - \frac{\gamma}{2} \left[\frac{(1-f)}{2} q + \frac{(1+f)}{2} q \right] = -\left(i\Omega + \frac{\gamma}{2}\right) q. \tag{8.13c}$$

Notamos que a soma das equações (8.13a) e (8.13b) resulta em zero conforme o esperado, uma vez que $P_+ + P_- = 1$ (normalização de ρ). Além disso, a equação para as coerências (8.13c) é desacoplada dos elementos diagonais, o que significa que as probabilidades $P_{\pm}(t)$ evoluem independentemente das coerências $q(t)$.

As equações acima podem ser facilmente resolvidas se usarmos novamente a normalização para escrever $P_{\pm} = 1 - P_{\mp}$. Assim, as equações (8.13a) e (8.13b) podem ser escritas como

$$\frac{dP_{\pm}}{dt} = \gamma \left(\frac{1 \mp f}{2} - P_{\pm} \right). \tag{8.14}$$

A solução geral da equação (8.14) é facilmente obtida, sendo dada por

$$P_{\pm}(t) = P_{\pm}(0)e^{-\gamma t} + \frac{1 \mp f}{2}(1 - e^{-\gamma t}). \tag{8.15}$$

Assim, a solução (8.15) descreve uma relaxação de $P_{\pm}(0)$ para o estado estacionário de equilíbrio

$$P_{\pm}(\infty) = \frac{1 \mp f}{2}. \tag{8.16}$$

É interessante notar que a relaxação para o equilíbrio vale mesmo para o caso de temperatura zero. Nesse caso, $f = \pm 1$ dependendo do sinal da separação entre os níveis, $\hbar\Omega$, e o sistema relaxa para o seu estado fundamental. A Figura 8.1 ilustra o comportamento de $P_{\pm}$ segundo às equações (8.15) e (8.16). Vemos na imagem (a) que após um tempo suficientemente

Figura 8.1: Probabilidades de ocupação dos estados fundamental $|-\rangle$ e excitado $|+\rangle$ do sistema de dois níveis. (a) Evolução temporal de $P_\pm(t)$ em função do tempo. O estado inicial é tal que $P_+(0) = 1$ e $P_-(0) = 0$ (sistema no estado excitado). (b) Probabilidades estacionárias em função do espaçamento entre os níveis de energia Ω . Os demais parâmetros adotados foram $\hbar = k_B = 1$, $\Omega = 1$ (figura (a)), $T = 0.1$ e $\gamma = 0.1$.

longo, o sistema relaxa para um estado estacionário de equilíbrio. Tal estado, nesse caso, é aproximadamente o estado fundamental, uma vez que a temperatura do sistema é próxima de zero. Na imagem (b), vemos o comportamento do sistema, já no estado de equilíbrio, em função do espaçamento entre os níveis de energia. Se o sistema em questão for uma partícula de *spin* $1/2$ por exemplo, Ω pode ser interpretado como um campo magnético externo $-h$. Nesse caso, quando $\Omega = h = 0$, o sistema se encontra aleatoriamente nos estados $|\pm\rangle$ com probabilidade $1/2$, independentemente de sua temperatura. Isso significa, fisicamente, que a polarização da partícula é nula.

A solução da equação (8.13c) para a coerência q também é facilmente obtida, e é dada por

$$q(t) = q(0)e^{-(i\Omega + \gamma/2)t}. \quad (8.17)$$

Notamos que $q(t)$ não depende de f , ou seja, da temperatura. Essa solução representa uma oscilação complexa (proveniente da parte unitária da dinâmica) que é exponencialmente atenuada devido o contato do sistema com o reservatório térmico (proveniente do dissipador). Portanto, após um tempo suficientemente longo, $q(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Isso mostra que, independentemente de seu estado inicial, o sistema sempre vai relaxar para um estado de equilíbrio térmico, dado pelo estado de Gibbs $\rho_{\text{eq}} \propto e^{-\beta\mathcal{H}}$, conforme a terceira propriedade dos dissipadores de Lindblad discutida anteriormente.

Para verificarmos que o estado de Gibbs é de fato solução estacionária de equilíbrio da equação mestra (8.9), vamos escrever explicitamente seus elementos de matriz e compará-los

8.1. Dinâmica Dissipativa

aos resultados obtidos para $P_{\pm}(\infty)$ e $q(\infty)$:

$$\begin{aligned}
 \rho_{\text{eq}} &= \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\sigma^z}}{\text{Tr}\{e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\sigma^z}\}}, \\
 &= \frac{1}{\langle + | e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\sigma^z} | + \rangle + \langle - | e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\sigma^z} | - \rangle} \begin{pmatrix} \langle + | e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\sigma^z} | + \rangle & \langle + | e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\sigma^z} | - \rangle \\ \langle - | e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\sigma^z} | + \rangle & \langle - | e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\sigma^z} | - \rangle \end{pmatrix}, \\
 &= \frac{1}{e^{\frac{\beta\hbar\Omega}{2}} + e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{\beta\hbar\Omega}{2}} \end{pmatrix}, \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}}}{e^{\frac{\beta\hbar\Omega}{2}} + e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}}} & 0 \\ 0 & \frac{e^{\frac{\beta\hbar\Omega}{2}}}{e^{\frac{\beta\hbar\Omega}{2}} + e^{-\frac{\beta\hbar\Omega}{2}}} \end{pmatrix}, \\
 \therefore \rho_{\text{eq}} &= \begin{pmatrix} \frac{1-f}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1+f}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_+(\infty) & q(\infty) \\ q^*(\infty) & P_-(\infty) \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{8.18}$$

Concluimos, portanto, que o estado de Gibbs é de fato o estado estacionário de equilíbrio do sistema. Além disso, esse estado é único pois, como vimos, não depende do estado inicial do sistema. Por esse motivo, o dissipador (8.7) é a escolha adequada para representar a interação de um único sistema de dois níveis com um reservatório térmico.

É possível mostrar também que as equações para os elementos diagonais (8.13a) e (8.13b) satisfazem o balanceamento detalhado. Para tanto, basta notarmos que essas equações evoluem segundo a equação mestra de Pauli

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \{W_{i,j}P_j - W_{j,i}P_i\}, \tag{8.19}$$

e que as taxas de transição $W_{i,j}$ satisfazem

$$\frac{W_{j,i}}{W_{i,j}} = e^{-\beta(\epsilon_j - \epsilon_i)}, \tag{8.20}$$

sendo ϵ_i a energia do i -ésimo nível do sistema. Para o sistema de dois níveis, temos que a energia de cada um dos níveis é dada por $\langle \pm | \mathcal{H} | \pm \rangle = \pm \hbar\Omega/2$. Assim, o lado direito da expressão acima resulta em $e^{\pm\beta\hbar\Omega}$. Para calcularmos o lado esquerdo, identificamos as taxas de transição $W_{+,-} = (\gamma/2)(1-f)$ e $W_{-,+} = (\gamma/2)(1+f)$ a partir das equações supracitadas. Assim, a condição

de balanceamento detalhado nos fornece ($i = -$ e $j = +$)

$$\frac{W_{+,-}}{W_{-,+}} = \frac{1-f}{1+f} = e^{-x}, \quad f = \tanh\left(\frac{x}{2}\right), \quad x = \beta\hbar\Omega. \quad (8.21)$$

Portanto, uma vez que os lados esquerdo e direito da expressão (8.20) são iguais, o balanceamento detalhado é satisfeito. É importante mencionar que essa é uma característica, não do modelo específico, mas da estrutura geral do dissipador de Lindblad, que é proveniente de uma derivação microscópica.

8.1.2 Oscilador Harmônico Quântico

Vamos considerar agora um oscilador harmônico quântico de frequência ω , cujo hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (8.22)$$

Conforme vimos no Capítulo 6, o dissipador típico para um único oscilador harmônico quântico é dado através da expressão (6.9)

$$\mathcal{D}(\rho) = \gamma(\bar{n} + 1) \left[a\rho a^\dagger - \frac{1}{2}(a^\dagger a\rho + \rho a^\dagger a) \right] + \gamma\bar{n} \left[a^\dagger \rho a - \frac{1}{2}(aa^\dagger \rho + \rho aa^\dagger) \right], \quad (8.23)$$

onde

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}, \quad (8.24)$$

é o número médio de ocupação. Comparando-se a expressão acima com a (8.3), identificamos os operadores de Lindblad,

$$L^- = \sqrt{\gamma(\bar{n} + 1)} a, \quad L^+ = \sqrt{\gamma\bar{n}} a^\dagger, \quad (8.25)$$

de modo análogo à expressão (6.10). Os operadores de Lindblad são usualmente conhecidos como operadores de salto (*jump operators*), pois representam a emissão (L^-) ou absorção (L^+) de excitação entre o sistema e o reservatório.

A equação mestra para o oscilador harmônico é então dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] + \gamma(\bar{n} + 1) \left[a\rho a^\dagger - \frac{1}{2}(a^\dagger a\rho + \rho a^\dagger a) \right] \\ + \gamma\bar{n} \left[a^\dagger \rho a - \frac{1}{2}(aa^\dagger \rho + \rho aa^\dagger) \right]. \end{aligned} \quad (8.26)$$

Para compreendermos melhor a equação mestra acima, vamos analisar os elementos diagonais

8.1. Dinâmica Dissipativa

do operador densidade, $P_n \equiv \langle n | \rho | n \rangle$, sendo os estados $|n\rangle$ autoestados de $\mathcal{H}$. Desta forma, cada um dos termos da equação mestra se torna

$$\begin{aligned} \langle n | [\mathcal{H}, \rho] | n \rangle &= 0, \\ \langle n | \left[a \rho a^\dagger - \frac{1}{2} (a^\dagger a \rho + \rho a^\dagger a) \right] | n \rangle &= (n+1)P_{n+1} - nP_n, \\ \langle n | \left[a^\dagger \rho a - \frac{1}{2} (a a^\dagger \rho + \rho a a^\dagger) \right] | n \rangle &= nP_{n-1} - (n+1)P_n, \end{aligned} \quad (8.27)$$

onde usamos as propriedades

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, & a^\dagger a|n\rangle &= n|n\rangle, \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, & [a, a^\dagger] &= 1. \end{aligned} \quad (8.28)$$

Portanto, temos que

$$\frac{1}{\gamma} \frac{dP_n}{dt} = (\bar{n} + 1) [(n+1)P_{n+1} - nP_n] + \bar{n} [nP_{n-1} - (n+1)P_n]. \quad (8.29)$$

Considerando que o operador densidade esteja normalizado, temos que $\text{Tr}\{\rho\} = \sum_n P_n = 1$. Assim, os elementos P_n correspondem às probabilidades de ocupação dos níveis de energia do oscilador harmônico. É interessante notar também que a equação (8.29) corresponde à uma equação mestra clássica para um processo de criação e aniquilação de partículas [2]. Essa analogia nos permite interpretar que a presença do reservatório térmico permite que haja saltos entre os níveis de energia do oscilador harmônico. O primeiro termo nos colchetes do lado direito da equação (8.29), representa a transição entre os estados $n+1 \rightarrow n$ (aniquilação de um *quantum* de energia). Já o segundo termo, representa a transição $n-1 \rightarrow n$ (absorção de um *quantum* de energia). No contexto de ótica quântica, por exemplo, o oscilador harmônico representa um único modo do campo eletromagnético quantizado no interior de uma cavidade ótica [95] e as transições $n+1 \rightarrow n$ e $n-1 \rightarrow n$ representam, respectivamente, processos de emissão e absorção de fótons. Um caso interessante é o reservatório térmico mantido à temperatura zero, o que implica $\bar{n} = 0$ (conforme a expressão (8.24)). Dessa maneira, não é mais possível que o sistema absorva fótons do reservatório. Entretanto, ainda é possível que o sistema emita um fóton pela transição $1 \rightarrow 0$. Tal processo é conhecido como *emissão espontânea* da cavidade.

Para ilustrar a evolução temporal de P_n , vamos considerar a solução da equação mestra (8.29) para dois estados iniciais ρ_0 distintos do oscilador harmônico: o estado fundamental

$$\rho_0 = |0\rangle\langle 0| \Rightarrow P_n(0) = \delta_{n,0}, \quad (8.30)$$

e o estado coerente [95]

$$\rho_0 = e^{-|\alpha|^2} \sum_{m,n} \frac{\alpha^n (\alpha^*)^m}{\sqrt{m!n!}} |n\rangle\langle m| \Rightarrow P_n(0) = e^{-|\alpha|^2} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!}, \quad (8.31)$$

sendo $|\alpha|^2$ o número de ocupação médio do estado coerente. Note que os elementos diagonais $P_n(0)$ do estado coerente são dados por uma distribuição de Poisson. Esse estado possui características bastante únicas, como por exemplo, é o estado cuja dinâmica (unitária) mais se assemelha ao comportamento oscilatório de um oscilador harmônico clássico. Tal estado corresponde, matematicamente, ao autoestado do operador aniquilação a . A Figura 8.2 foi obtida através da solução numérica² da equação (8.29) considerando-se as condições iniciais (8.30) e (8.31). Observamos claramente que a distribuição das probabilidades de ocupação

Figura 8.2: Distribuição das probabilidades de ocupação P_n dos níveis n do oscilador harmônico para quatro instantes distintos. Os parâmetros utilizados para a solução numérica foram $|\alpha|^2 = 10$, $\hbar = k_B = 1$, $\beta = 1/T = 1$, $\omega = 1$ e $\gamma = 0.1$.

tendem à uma distribuição estacionária única após um tempo suficientemente longo, para ambas as condições iniciais. Tal distribuição estacionária, conforme veremos adiante, corresponde justamente à distribuição de Gibbs.

²Para a primeira condição inicial considerada, é possível obter uma solução analítica para $P_n(t)$. Entretanto, não vamos apresentá-la aqui pois estamos interessados apenas na solução estacionária.

8.1. Dinâmica Dissipativa

Assim, como no caso do sistema de dois níveis, é possível também reescrever a equação mestra (8.29) como uma equação mestra de Pauli, definida em (8.19), e verificar que a condição de balanceamento detalhado é satisfeita. Para tanto, reescrevemos

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\gamma} \frac{dP_n}{dt} &= (\bar{n} + 1) [(n + 1)P_{n+1} - nP_n] + \bar{n} [nP_{n-1} - (n + 1)P_n], \\
 &= [(\bar{n} + 1)(n + 1)P_{n+1} - \bar{n}(n + 1)P_n] + [\bar{n}nP_{n-1} - (\bar{n} + 1)nP_n], \\
 &= [b_{n+1}P_{n+1} - a_nP_n] + [a_{n-1}P_{n-1} - b_nP_n], \\
 &= [W_{n,n+1}P_{n+1} - W_{n+1,n}P_n] + [W_{n,n-1}P_{n-1} - W_{n-1,n}P_n],
 \end{aligned} \tag{8.32}$$

onde identificamos os termos $W_{n+1,n} = a_n \equiv \gamma\bar{n}(n + 1)$ e $W_{n-1,n} = b_n \equiv \gamma(\bar{n} + 1)n$. Dessa forma, o lado esquerdo da equação de balanceamento detalhado (8.20) fica

$$\frac{W_{n+1,n}}{W_{n,n+1}} = \frac{W_{n,n-1}}{W_{n-1,n}} = \frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} = e^{-\beta\hbar\omega}, \tag{8.33}$$

onde usamos a definição (8.24). Já o lado direito é facilmente obtido, uma vez que para o oscilador harmônico $\epsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Assim, $\epsilon_{n+1} - \epsilon_n = \hbar\omega$ e, portanto, $e^{-\beta(\epsilon_{n+1} - \epsilon_n)} = e^{-\beta\hbar\omega}$. Logo, o balanceamento detalhado é verificado para a equação mestra do oscilador harmônico quântico.

Solução Estacionária

Vamos agora olhar para o estado estacionário da equação (8.26). Queremos verificar se, de fato, o estado de equilíbrio de Gibbs $\rho_{\text{eq}} \propto e^{-\beta\mathcal{H}}$ é sua solução única, conforme a terceira propriedade dos dissipadores de Lindblad listada anteriormente. Equivalentemente, devemos verificar se $\mathcal{D}(\rho_{\text{eq}}) = 0$, sendo o dissipador dado pela expressão (8.23). Antes, porém, vamos analisar primeiro o estado estacionário da equação mestra (8.29), pois é mais simples e nos permitirá ter uma ideia da solução geral.

O estado de Gibbs

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z_{\text{eq}}}, \quad Z_{\text{eq}} = \text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}}\}, \tag{8.34}$$

é tal que, para o hamiltoniano do oscilador harmônico quântico (8.22), é dado por

$$\rho_{\text{eq}} = (1 - e^{-\beta\hbar\omega})e^{-\beta\hbar\omega a^\dagger a}, \tag{8.35}$$

onde usamos

$$\begin{aligned}
 Z_{\text{eq}} &= \text{Tr}\{e^{-\beta\hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)}\}, \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta\hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)} | n \rangle, \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)}, \\
 &= e^{-\beta\hbar\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n}, \\
 &= e^{-\beta\hbar\omega/2} (1 - e^{-\beta\hbar\omega})^{-1}.
 \end{aligned} \tag{8.36}$$

Os elementos diagonais $P_n^{\text{eq}} \equiv \langle n | \rho_{\text{eq}} | n \rangle$ do estado de Gibbs (8.35) são, portanto, dados por

$$\begin{aligned}
 P_n^{\text{eq}} &= \langle n | \rho_{\text{eq}} | n \rangle, \\
 &= (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \langle n | e^{-\beta\hbar\omega a^\dagger a} | n \rangle, \\
 &= (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) e^{-\beta\hbar\omega n}.
 \end{aligned} \tag{8.37}$$

Usando a definição de $\bar{n}$ dada na expressão (8.24), encontramos as relações

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad \bar{n} + 1 = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad \frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} = e^{-\beta\hbar\omega}, \tag{8.38}$$

que nos permitem reescrever a expressão (8.37) como

$$P_n^{\text{eq}} = \frac{1}{\bar{n} + 1} \left(\frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} \right)^n. \tag{8.39}$$

A fim de verificarmos que (8.39) é uma solução estacionária da equação (8.29), usamos as relações

$$P_{n+1}^{\text{eq}} = P_n^{\text{eq}} \left(\frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} \right), \quad P_{n-1}^{\text{eq}} = P_n^{\text{eq}} \left(\frac{\bar{n} + 1}{\bar{n}} \right), \tag{8.40}$$

que substituídas no lado direito da equação mestra e fazendo $dP_n^{\text{eq}}/dt = 0$ no lado esquerdo, nos fornece

$$\begin{aligned}
 0 &\stackrel{?}{=} (\bar{n} + 1) \left[(n + 1) \frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} - n \right] P_n^{\text{eq}} + \bar{n} \left[n \frac{\bar{n} + 1}{\bar{n}} - (n + 1) \right] P_n^{\text{eq}}, \\
 &\stackrel{?}{=} [(n + 1)\bar{n} - (\bar{n} + 1)n] P_n^{\text{eq}} + [\bar{n}(\bar{n} + 1) - \bar{n}(n + 1)] P_n^{\text{eq}}, \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{8.41}$$

Concluimos, portanto, que P_n^{eq} dado na expressão (8.37) ou, equivalentemente, por (8.39), é uma solução estacionária da equação mestra (8.29). Isso garante que o estado de Gibbs

8.1. Dinâmica Dissipativa

é, de fato, o estado de equilíbrio térmico do sistema. Além disso, essa solução é única, o que significa que, independentemente do estado inicial do sistema, seu estado de equilíbrio é sempre o mesmo, caracterizado apenas pela temperatura do reservatório térmico, conforme exemplificado na **Figura 8.2**.

Vamos agora realizar o mesmo procedimento para a equação mestra (8.26). Para tanto, basta verificarmos se $\mathcal{D}(\rho_{\text{eq}}) = 0$, conforme havíamos previamente mencionado. E para verificarmos também a unicidade da solução, vamos considerar o *ansatz* $\rho = e^{-\lambda a^\dagger a}$. Dessa forma, o estado de Gibbs $\rho_{\text{eq}} \propto e^{-\beta \hbar \omega a^\dagger a}$ será uma solução única se e somente se $\lambda = \beta \hbar \omega$. Substituindo, portanto, o nosso *ansatz* na expressão (8.23), obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(e^{-\lambda a^\dagger a}) = \gamma(\bar{n} + 1) & \left[a e^{-\lambda a^\dagger a} a^\dagger - \frac{1}{2} (a^\dagger a e^{-\lambda a^\dagger a} + e^{-\lambda a^\dagger a} a^\dagger a) \right] \\ & + \gamma \bar{n} \left[a^\dagger e^{-\lambda a^\dagger a} a - \frac{1}{2} (a a^\dagger e^{-\lambda a^\dagger a} + e^{-\lambda a^\dagger a} a a^\dagger) \right]. \end{aligned} \quad (8.42)$$

Devemos agora reordenar cada um dos termos nos colchetes da expressão acima. Os termos nos parênteses de cada um deles são triviais, pois $[a^\dagger a, e^{-\lambda a^\dagger a}] = 0$ e $[a a^\dagger, e^{-\lambda a^\dagger a}] = 0$, uma vez que $a a^\dagger = a^\dagger a + 1$. Os termos restantes podem ser reordenados com o auxílio das relações

$$e^{-\lambda a^\dagger a} a e^{\lambda a^\dagger a} = e^{-\lambda} a, \quad (8.43a)$$

$$e^{-\lambda a^\dagger a} a^\dagger e^{\lambda a^\dagger a} = e^{-\lambda} a^\dagger, \quad (8.43b)$$

calculadas a partir da conhecida fórmula de Baker-Hausdorff-Campbell

$$e^{-\lambda A} B e^{\lambda A} = B - \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, B]] - \frac{\lambda^3}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots, \quad (8.44)$$

e usando as relações de comutação $[a^\dagger a, a] = -a$ e $[a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger$. Multiplicando (8.43a) e (8.43b) por $e^{-\lambda a^\dagger a}$ pela direita, temos

$$a e^{-\lambda a^\dagger a} = e^{-\lambda} e^{-\lambda a^\dagger a} a, \quad (8.45a)$$

$$a^\dagger e^{-\lambda a^\dagger a} = e^{-\lambda} e^{-\lambda a^\dagger a} a^\dagger. \quad (8.45b)$$

Substituindo as expressões acima na equação (8.42) e igualando a zero, obtemos

$$\mathcal{D}(e^{-\lambda a^\dagger a}) = e^{-\lambda a^\dagger a} \left[(\bar{n} + 1)(e^{-\lambda} a a^\dagger - a^\dagger a) + \bar{n}(e^{-\lambda} a^\dagger a - a a^\dagger) \right] = 0. \quad (8.46)$$

Após algumas manipulações algébricas, a equação (8.46) se torna

$$\bar{n} \left[(1 - e^\lambda) a a^\dagger + (e^{2\lambda} - e^\lambda) a^\dagger a \right] = e^\lambda a^\dagger a - a a^\dagger, \quad (8.47)$$

de forma que, fazendo a identificação dos termos, obtemos as seguintes equações

$$\bar{n}(e^{2\lambda} - e^\lambda) = e^\lambda, \quad (8.48a)$$

$$\bar{n}(1 - e^\lambda) = -1. \quad (8.48b)$$

A solução é idêntica para as duas equações acima, que é dada por

$$e^{-\lambda} = \frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} = e^{-\beta\hbar\omega} \Rightarrow \lambda = \beta\hbar\omega, \quad (8.49)$$

onde usamos as relações em (8.38). Portanto, concluímos que o estado de Gibbs é a única solução estacionária para a equação mestra de Lindblad (8.26). E mostramos, assim, que o dissipador (8.23) satisfaz, de fato, as três propriedades listadas anteriormente.

8.1.3 Férmião Livre

Como último exemplo, vamos considerar o hamiltoniano de um único férmion livre

$$\mathcal{H} = \hbar\Omega \left(\eta^\dagger \eta - \frac{1}{2} \right), \quad (8.50)$$

sendo $\hbar\Omega$ a energia de separação entre os níveis $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Os operadores $\eta^\dagger$ e η são tais que $\{\eta, \eta^\dagger\} = 1$ (conforme vimos na Seção 7.1). Para esse sistema, uma escolha de dissipador que satisfaça as três propriedades discutidas anteriormente é

$$\mathcal{D}(\rho) = \gamma(1 - \bar{n}) \left[\eta \rho \eta^\dagger - \frac{1}{2}(\eta^\dagger \eta \rho + \rho \eta^\dagger \eta) \right] + \gamma\bar{n} \left[\eta^\dagger \rho \eta - \frac{1}{2}(\eta \eta^\dagger \rho + \rho \eta \eta^\dagger) \right], \quad (8.51)$$

onde

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\Omega} + 1}, \quad (8.52)$$

é agora a distribuição de Fermi-Dirac. Os operadores de Lindblad para esse dissipador são dados por

$$L^- = \sqrt{\gamma(1 - \bar{n})} \eta, \quad L^+ = \sqrt{\gamma\bar{n}} \eta^\dagger, \quad (8.53)$$

É imediato notar a semelhança do dissipador (8.51) com aquele dado na expressão (8.23) para o oscilador harmônico quântico, bem como dos operadores de Lindblad (8.53) e (8.25). A

8.1. Dinâmica Dissipativa

equação mestra para a partícula fermiônica então fica

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] + \gamma(1 - \bar{n}) \left[\eta \rho \eta^\dagger - \frac{1}{2}(\eta^\dagger \eta \rho + \rho \eta^\dagger \eta) \right] \\ + \gamma \bar{n} \left[\eta^\dagger \rho \eta - \frac{1}{2}(\eta \eta^\dagger \rho + \rho \eta \eta^\dagger) \right]. \end{aligned} \quad (8.54)$$

É interessante mencionar que podemos obter o dissipador para a partícula fermiônica a partir do dissipador para o sistema de dois níveis (8.7) se recorrermos à transformação de Jordan-Wigner (7.5) para escrever

$$\sigma^+ = \eta^\dagger, \quad \sigma^- = \eta, \quad \sigma^z = 2\eta^\dagger \eta - 1. \quad (8.55)$$

Estabelecemos também as seguintes relações entre $f = \tanh(\beta \hbar \Omega / 2)$ e $\bar{n}$ [dado em (8.52)]:

$$\frac{1+f}{2} = 1 - \bar{n}, \quad \frac{1-f}{2} = \bar{n}. \quad (8.56)$$

Assim, substituindo as relações (8.55) e (8.56) no dissipador para o sistema de dois níveis (8.7), obtemos prontamente o dissipador fermiônico (8.51). Dessa forma, a dinâmica da partícula fermiônica é equivalente à dinâmica do sistema de dois níveis.

O estado de Gibbs $\rho_{\text{eq}} \propto e^{-\beta \mathcal{H}}$ para a partícula fermiônica pode ser obtido facilmente a partir do estado de Gibbs do sistema de dois níveis, dado pela expressão (8.18). Tal estado pode ser reescrito como

$$\rho_{\text{eq}} = \begin{pmatrix} \frac{1-f}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1+f}{2} \end{pmatrix} = \frac{1-f\sigma^z}{2}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.57)$$

Assim, utilizando as relações (8.55) e (8.56), reescrevemos a expressão acima como

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{Tr}\{e^{-\beta \mathcal{H}}\}} = (1 - \bar{n}) - (1 - 2\bar{n})\eta^\dagger \eta. \quad (8.58)$$

Para verificarmos que o estado acima satisfaz, de fato, a condição $\mathcal{D}(\rho_{\text{eq}}) = 0$, substituímos a

expressão (8.58) no dissipador (8.51); dessa forma, temos ($a = 1 - \bar{n}$ e $b = 1 - 2\bar{n}$)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}(\rho_{\text{eq}}) &= \gamma(1 - \bar{n}) \left[\eta(a - b\eta^\dagger\eta)\eta^\dagger - \frac{1}{2} \{ \eta^\dagger\eta, (a - b\eta^\dagger\eta) \} \right] \\
 &\quad + \gamma\bar{n} \left[\eta^\dagger(a - b\eta^\dagger\eta)\eta - \frac{1}{2} \{ \eta\eta^\dagger, (a - b\eta^\dagger\eta) \} \right], \\
 &= \gamma(1 - \bar{n}) \left[a(\eta\eta^\dagger - \eta^\dagger\eta) - b(\eta\eta^\dagger - \eta^\dagger\eta) \right] + \gamma\bar{n} \left[a(\eta^\dagger\eta - \eta\eta^\dagger) \right], \\
 &= \gamma(1 - \bar{n}) \left[(a - b)(\eta\eta^\dagger - \eta^\dagger\eta) \right] + \gamma\bar{n} \left[a(\eta^\dagger\eta - \eta\eta^\dagger) \right], \\
 &= \gamma(a - b)(\eta\eta^\dagger - \eta^\dagger\eta) - \gamma\bar{n}(2a - b)(\eta\eta^\dagger - \eta^\dagger\eta), \\
 &= \gamma\bar{n}(\eta\eta^\dagger - \eta^\dagger\eta) - \gamma\bar{n}(\eta\eta^\dagger - \eta^\dagger\eta),
 \end{aligned} \tag{8.59}$$

$$\therefore \mathcal{D}(\rho_{\text{eq}}) = 0,$$

onde usamos a idempotência dos operadores $\eta^\dagger\eta$ e $\eta\eta^\dagger = 1 - \eta^\dagger\eta$. Além disso, usamos também o princípio de exclusão de Pauli, $\eta^\dagger\eta^\dagger = \eta\eta = 0$, para simplificar os termos de quatro operadores. O resultado (8.59) confirma, portanto, que o estado de Gibbs é a solução estacionária do dissipador para a partícula fermiônica.

Para encerrarmos a discussão sobre o férmion livre, vamos analisar o balanceamento detalhado. Assim como nos modelos anteriores, essa propriedade pode ser verificada através das equações de evolução temporal para os elementos diagonais do operador densidade. Nesse caso, esses elementos são $\langle 0 | \rho | 0 \rangle \equiv P_0$ e $\langle 1 | \rho | 1 \rangle \equiv P_1$, de forma que a equação mestra (8.54) para cada um desses elementos é dada por

$$\frac{dP_0}{dt} = \gamma(1 - \bar{n})P_1 - \gamma\bar{n}P_0, \tag{8.60a}$$

$$\frac{dP_1}{dt} = \gamma\bar{n}P_0 - \gamma(1 - \bar{n})P_1. \tag{8.60b}$$

Comparando, por exemplo, a equação (8.60a) com a equação mestra de Pauli (8.19), identificamos as taxas de transição $W_{0,1} = \gamma(1 - \bar{n})$ e $W_{1,0} = \gamma\bar{n}$, de forma que o lado esquerdo da condição de balanceamento detalhado (8.20) se torna

$$\frac{W_{1,0}}{W_{0,1}} = \frac{\bar{n}}{1 - \bar{n}} = e^{-\beta\hbar\Omega}, \tag{8.61}$$

onde usamos a definição (8.52). Já o lado direito, lembrando que as energias da partícula fermiônica valem $\epsilon_0 = \langle 0 | \mathcal{H} | 0 \rangle = -\hbar\Omega/2$ e $\epsilon_1 = \langle 1 | \mathcal{H} | 1 \rangle = +\hbar\Omega/2$, se torna $e^{-\beta(\epsilon_1 - \epsilon_0)} = e^{-\beta\hbar\Omega}$. Logo, os lados esquerdo e direito são iguais e a condição de balanceamento detalhado é verificada.

Finalizamos aqui essa abordagem simplificada sobre dissipadores de Lindblad. Todas as

8.2. Dinâmica de Lindblad para Múltiplos Sítios

propriedades relevantes dos dissipadores foram discutidas, de forma que agora estamos aptos a seguir adiante e desenvolver o método dos dissipadores de Lindblad aplicados em múltiplos sítios. É importante destacar que todos os dissipadores exemplificados anteriormente podem ser derivados microscopicamente. Entretanto, mesmo para os sistemas simples mostrados aqui, tais derivações são muito extensas para serem feitas no texto principal desta tese. Mais detalhes sobre a derivação microscópica dos dissipadores apresentados podem ser encontrados, por exemplo, nas referências [5, 95, 102, 103]. Uma abordagem alternativa às anteriores pode ser vista, por exemplo, no apêndice da referência [52].

8.2 Dinâmica de Lindblad para Múltiplos Sítios

Discutidos os dissipadores de Lindblad para alguns sistemas simples compostos por uma única partícula, vamos agora descrever o método que utilizamos neste trabalho, onde os dissipadores atuam em um grupo de partículas. Para tanto, vamos considerar uma cadeia de *spins* do tipo XX composta por L partículas, conforme apresentamos no [Capítulo 7](#), cujo hamiltoniano, dado pela expressão (7.1), é

$$\mathcal{H}_{XX} = -\frac{h}{2} \sum_{\ell=1}^L \sigma_{\ell}^z - \frac{t}{2} \sum_{\ell=1}^{L-1} (\sigma_{\ell}^x \sigma_{\ell+1}^x + \sigma_{\ell}^y \sigma_{\ell+1}^y), \quad (8.62)$$

lembrando que h é o campo magnético externo na direção z e t é a energia de interação entre *spins* vizinhos. Esse hamiltoniano pode ser ainda reescrito em termos de operadores fermiônicos $\{\eta_{\ell}^{\dagger}, \eta_{\ell}\}$ através da transformação de Jordan-Wigner, conforme a expressão (7.15):

$$\mathcal{H}_{XX} = -h \sum_{\ell=1}^L \eta_{\ell}^{\dagger} \eta_{\ell} - t \sum_{\ell=1}^{L-1} (\eta_{\ell+1}^{\dagger} \eta_{\ell} + \eta_{\ell}^{\dagger} \eta_{\ell+1}). \quad (8.63)$$

Finalmente, o hamiltoniano acima pode ser diagonalizado através de uma transformada de Fourier, representada pela transformação

$$\tilde{\eta}_k = \sum_{\ell=1}^L S_{\ell k} \eta_{\ell}, \quad S_{\ell k} = \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sin(k\ell), \quad k = \frac{\pi}{L+1}, \dots, \frac{L\pi}{L+1}, \quad (8.64)$$

que nos dá

$$\mathcal{H}_{XX} = \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_k^{\dagger} \tilde{\eta}_k, \quad \epsilon_k = -h - 2t \cos k \quad (8.65)$$

conforme obtido na expressão (7.27).

Vamos supor agora que desejamos acoplar toda a cadeia a um reservatório de temperatura

T e potencial químico μ . Para tanto, conforme vimos no capítulo anterior, isso pode ser feito através da escolha de um dissipador apropriado $\mathcal{D}(\rho)$ na equação mestra do sistema. E como discutimos no [Capítulo 6](#), tal dissipador deveria, a princípio, ser derivado a partir de uma descrição microscópica da interação sistema-reservatório. Entretanto, para o sistema em questão, tal derivação pode ser extremamente simplificada se notarmos que o hamiltoniano (8.65) consiste, efetivamente, em uma soma de modos normais fermiônicos não interagentes. Dessa forma, é intuitivo deduzirmos que o dissipador apropriado para esse sistema corresponde a uma soma de dissipadores fermiônicos que atuam, independentemente, em cada modo normal k . Assim,

$$\mathcal{D}(\rho) = \sum_k \mathcal{D}_k(\rho), \quad k = \frac{\pi}{L+1}, \dots, \frac{L\pi}{L+1}. \quad (8.66)$$

Os dissipadores $\mathcal{D}_k(\rho)$ correspondem, portanto, a dissipadores de um único modo fermiônico de pseudomomento k . Esses dissipadores são justamente equivalentes àquele dado na [Subseção 8.1.3](#) para um único férmion livre. Portanto, usando a equação (8.51), temos ($\hbar = k_B = 1$)

$$\mathcal{D}_k(\rho) = 2\gamma_k(1 - \bar{n}_k) \left[\tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \} \right] + 2\gamma_k \bar{n}_k \left[\tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \} \right], \quad (8.67)$$

onde

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}, \quad \beta = 1/T, \quad (8.68)$$

é a distribuição de Fermi-Dirac para o k -ésimo modo. Os fatores 2 presentes no dissipador (8.67) foram colocados para simplificar os cálculos que serão realizados posteriormente. Toda a informação sobre o acoplamento do sistema com o reservatório, como por exemplo quais partículas estão, de fato, acopladas ao banho, está contida nas constantes positivas γ_k .

Podemos verificar facilmente que o estado de Gibbs no *ensemble* grande canônico $\rho_{\text{eq}} \propto e^{-\beta(\mathcal{H}_{XX} - \mu N)}$, sendo N o número total de partículas, satisfaz a condição $\mathcal{D}(\rho_{\text{eq}}) = 0$. Para tanto, escrevemos

$$\begin{aligned} \rho_{\text{eq}} &\propto e^{-\beta(\mathcal{H}_{XX} - \mu N)}, \\ &\propto e^{-\beta \sum_k (\epsilon_k - \mu) \tilde{n}_k}, \\ &\propto \prod_k e^{-\beta(\epsilon_k - \mu) \tilde{n}_k}, \\ \therefore \rho_{\text{eq}} &\propto \prod_k \rho_{\text{eq}}^{(k)}, \end{aligned} \quad (8.69)$$

onde definimos o operador número $\tilde{n}_k \equiv \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k$ e usamos $\sum_k \tilde{n}_k = N$. Definimos também o operador densidade de equilíbrio para o k -ésimo modo $\rho_{\text{eq}}^{(k)} \propto e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}$. Note que a passagem da segunda para a terceira linha da expressão acima pôde ser feita pois $[\tilde{n}_k, \tilde{n}_q] = 0$. Assim,

8.2. Dinâmica de Lindblad para Múltiplos Sítios

substituindo o resultado anterior na expressão (8.66), temos

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}(\rho_{\text{eq}}) &= \sum_k \mathcal{D}_k(\rho_{\text{eq}}), \\
 &= \sum_k \mathcal{D}_k \left(\prod_q \rho_{\text{eq}}^{(q)} \right), \\
 &= \left(\prod_{q \neq k} \rho_{\text{eq}}^{(q)} \right) \sum_k \mathcal{D}_k \left[\rho_{\text{eq}}^{(k)} \right], \\
 \therefore \mathcal{D}(\rho_{\text{eq}}) &= 0,
 \end{aligned} \tag{8.70}$$

onde, na penúltima linha, usamos o resultado (8.59). O resultado (8.70) nos permite concluir, portanto, que cada dissipador $\mathcal{D}_k(\rho)$ termaliza corretamente cada modo k do sistema, de forma que o dissipador total se anula. Isso só é possível pois os dissipadores atuam sobre os modos normais do sistema e não diretamente sobre cada partícula. No espaço dos momentos, os modos normais estão desacoplados e o operador densidade do estado de Gibbs assume uma forma de produto, permitindo que cada modo seja, então, termalizado. Da mesma forma, uma vez que cada dissipador $\mathcal{D}_k(\rho)$ satisfaz o balanceamento detalhado (conforme vimos na expressão (8.61), para a partícula fermiônica), o dissipador total também deverá satisfazer, dado que ele consiste na combinação linear dos dissipadores $\mathcal{D}_k(\rho)$.

Acoplamento com os Reservatórios

Vamos agora apresentar a forma final do problema, descrevendo uma cadeia de *spins* do tipo XX de tamanho L submetida, através de suas extremidades, ao contato com dois reservatórios de temperaturas e potenciais químicos distintos, conforme ilustra a **Figura 6.1b**. Para tanto, vamos dividir a cadeia, em três segmentos que iremos denominar A , B e C , de tamanhos L_a , L_b e L_c , respectivamente, de forma que o tamanho total da cadeia é $L = L_a + L_b + L_c$. Por simplicidade, vamos adotar $L_a = L_c$. O caso particular em que $L_b = 0$, representado na **Figura 6.1c**, também será considerado.

O hamiltoniano da cadeia, na representação fermiônica, é dado pela expressão (8.63). Por uma questão de conveniência e notação, vamos renomear os operadores fermiônicos η_ℓ da seguinte forma: $\eta_\ell = a_\ell$ para $\ell \in [1, L_a]$, $\eta_{L_a+\ell} = b_\ell$ para $\ell \in [1, L_b]$ e $\eta_{L_a+L_b+\ell} = c_\ell$ para $\ell \in [1, L_c]$. Dessa forma, o hamiltoniano (8.63) é dividido em

$$\mathcal{H}_{XX} = \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_b + \mathcal{H}_c + V_{ab} + V_{bc}, \tag{8.71}$$

onde

$$\mathcal{H}_\alpha = -h \sum_{\ell=1}^{L_\alpha} \alpha_\ell^\dagger \alpha_\ell - t \sum_{\ell=1}^{L_\alpha-1} \left(\alpha_\ell^\dagger \alpha_{\ell+1} + \alpha_{\ell+1}^\dagger \alpha_\ell \right), \quad (8.72)$$

sendo $\alpha \in \{a, b, c\}$, notação que usaremos daqui por diante para designar tanto cada um dos três segmentos da cadeia, quanto seus respectivos operadores de criação e aniquilação.

Para os termos de interação entre cada segmento, V_{ab} e V_{bc} , vamos introduzir uma ligeira modificação em relação ao modelo original e escrevê-lo como

$$V_{ab} = -g \left(a_{L_a}^\dagger b_1 + b_1^\dagger a_{L_a} \right), \quad (8.73a)$$

$$V_{bc} = -g \left(b_{L_b}^\dagger c_1 + c_1^\dagger b_{L_b} \right). \quad (8.73b)$$

Consideramos aqui um parâmetro g no acoplamento entre as cadeias, ao invés de t . Notamos que, para $g = t$, recuperamos a cadeia uniforme original, conforme o hamiltoniano (8.63). Fisicamente, $g \neq t$ significa que a taxa de tunelamento (ou *hopping*) para cada segmento da cadeia é diferente da taxa de tunelamento entre diferentes segmentos. O motivo pelo qual fizemos tal escolha é que, no regime $g \ll t$, poderemos tratar o problema de forma analítica usando teoria de perturbação.

Por fim, desejamos acoplar os segmentos das extremidades, A e C , a reservatórios distintos. Tal acoplamento deve ser feito, conforme discutimos no início desta seção, através dos modos normais de cada um desses segmentos, e não diretamente com os operadores a_ℓ e c_ℓ . Assim, devemos diagonalizar cada segmento da cadeia *individualmente*. Esse processo é feito definindo-se as matrizes ortogonais de transformação, conforme a expressão (8.64), para cada um dos três segmentos, porém com suas respectivas dimensões, L_a , L_b e L_c . Para sermos consistentes com a notação adotada, vamos nomear a matriz para cada um dos segmentos como S^α , onde $\alpha \in \{a, b, c\}$. É importante notar que, para cada matriz S^α , os valores permitidos de k podem ser distintos, conforme mostra a expressão (8.64).

Assim, definimos três novos conjuntos de operadores a_k , b_k e c_k na representação de Fourier, que diagonaliza *individualmente* cada cadeia, conforme a expressão (8.64), de forma que³

$$\alpha_k = \sum_{\ell=1}^{L_\alpha} S_{\ell k}^\alpha \alpha_\ell, \quad (8.74)$$

sendo

$$S_{\ell k}^\alpha = \sqrt{\frac{2}{L_\alpha + 1}} \sin(k\ell), \quad k = \frac{\pi}{L_\alpha + 1}, \dots, \frac{L_\alpha \pi}{L_\alpha + 1}, \quad (8.75)$$

³A partir de agora iremos suprimir o uso do “til” para indicar operadores no espaço de Fourier, a fim de evitar que a notação fique sobrecarregada. A distinção será feita através dos índices, sendo as letras k e q reservadas aos operadores no espaço de Fourier, e índices como ℓ , m e n reservados para o espaço real.

8.2. Dinâmica de Lindblad para Múltiplos Sítios

com $\alpha \in \{a, b, c\}$, conforme já havíamos definido. O hamiltoniano diagonalizado de cada segmento e suas respectivas autoenergias são então dados, conforme a expressão (8.65), por

$$\mathcal{H}_\alpha = \sum_k \epsilon_{\alpha,k} \alpha_k^\dagger \alpha_k, \quad \epsilon_{\alpha,k} = -h - 2t \cos k. \quad (8.76)$$

Em princípio, poderíamos escrever apenas ϵ_k ao invés de $\epsilon_{\alpha,k}$, mas manteremos essa notação para facilitar o acompanhamento dos cálculos. Essa notação é também conveniente pois enfatiza que os próprios valores permitidos de k dependem de α . Nessa notação podemos, ainda, escrever a relação de anticomutação entre os operadores dos segmentos da cadeia como

$$\{\alpha_k, (\alpha'_q)^\dagger\} = \delta_{k,q} \delta_{\alpha,\alpha'}, \quad \{\alpha_k, \alpha'_q\} = \{\alpha_k^\dagger, (\alpha'_q)^\dagger\} = 0. \quad (8.77)$$

Para calcularmos os termos de interação (8.73), devemos obter a transformada de Fourier dos operadores a_{L_a} , b_1 , b_{L_b} e c_1 . Esse cálculo pode ser realizado usando a transformação inversa da transformação (8.74), que é dada por

$$\alpha_\ell = \sum_k S_{\ell k}^\alpha \alpha_k, \quad (8.78)$$

onde exploramos a ortogonalidade e a simetria de S^α . Dessa forma, obtemos

$$\begin{aligned} a_{L_a} &= \sum_k S_{L_a, k}^a a_k, \\ b_{1(L_b)} &= \sum_k S_{1(L_b), k}^b b_k, \\ c_1 &= \sum_k S_{1, k}^c c_k. \end{aligned} \quad (8.79)$$

Assim, usando o resultado anterior, os termos de interação se tornam

$$V_{ab} = -g \sum_{k,q} S_{L_a, k}^a S_{1, q}^b (a_k^\dagger b_q + b_q^\dagger a_k), \quad (8.80a)$$

$$V_{bc} = -g \sum_{q,k} S_{L_b, q}^b S_{1, k}^c (b_q^\dagger c_k + c_k^\dagger b_q). \quad (8.80b)$$

Por fim, acoplamos os segmentos A e C aos reservatórios, de forma que a equação mestra

do sistema fica⁴ ($\hbar = k_B = 1$)

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -i [\mathcal{H}_{XX}, \rho] + \mathcal{D}_a(\rho) + \mathcal{D}_c(\rho), \quad (8.81)$$

onde os dissipadores de Lindblad $\mathcal{D}_a(\rho)$ e $\mathcal{D}_b(\rho)$ são dados, conforme a expressão (8.67), por

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\alpha(\rho) = \sum_k 2\gamma_{\alpha,k} (1 - \bar{n}_{\alpha,k}) \left[\alpha_k \rho \alpha_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \alpha_k^\dagger \alpha_k, \rho \} \right] \\ + 2\gamma_{\alpha,k} \bar{n}_{\alpha,k} \left[\alpha_k^\dagger \rho \alpha_k - \frac{1}{2} \{ \alpha_k \alpha_k^\dagger, \rho \} \right], \end{aligned} \quad (8.82)$$

e

$$\bar{n}_{\alpha,k} = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\alpha,k} - \mu)/T_\alpha} + 1}, \quad (8.83)$$

conforme a expressão (8.68). Nós iremos assumir ao longo de nossas análises que $\gamma_{\alpha,k} \equiv \gamma$ (exceto para o segmento B , onde $\gamma_{b,k} \equiv 0$, uma vez que não está acoplado a nenhum reservatório) mas, novamente, por uma questão de organização e consistência, vamos manter essa notação durante os cálculos.

Vimos anteriormente que o dissipador $\mathcal{D}_\alpha(\rho)$ correspondente a cada segmento da cadeia termaliza corretamente esse segmento, além de satisfazer o balanceamento detalhado. Entretanto, agora, quando acoplamos os três segmentos, essas duas propriedades deixam de ser verificadas. Uma questão importante que surge, então, é se é possível recuperar tais propriedades para um dado intervalo dos parâmetros do modelo. Nesse sentido, justamente, mostraremos adiante com os resultados obtidos a partir da dinâmica descrita pela equação mestra (8.81), juntamente com o dissipador (8.82), que é possível recuperar tais propriedades para um acoplamento com os reservatórios γ suficientemente pequeno. Fisicamente nós esperamos, de fato, que $\gamma \ll t$, uma vez que γ descreve a taxa com que as partículas são injetadas no sistema, enquanto a taxa de tunelamento t descreve tempos característicos de propagação das excitações através da cadeia. Contudo, vamos considerar em nossas análises todos os valores de γ , com o propósito de compreendermos exatamente como tal parâmetro modifica o estado estacionário de não-equilíbrio do sistema, a termalização e o balanceamento detalhado.

⁴Para evitarmos confusão com a letra t , usada para a taxa de tunelamento no hamiltoniano do sistema, representaremos o tempo, a partir de agora, pela letra grega τ .

Capítulo 9

Resultados e Análises

Neste capítulo vamos apresentar e discutir os resultados obtidos a partir da solução da equação mestra (8.81). Veremos que podemos obter uma solução analítica para o problema se considerarmos o regime perturbativo $g \ll t$ para tamanhos arbitrários do sistema, incluindo o limite termodinâmico. Em outros regimes, uma solução numericamente exata pode ser obtida. A seguir, vamos obter uma versão matricial da equação mestra (8.81) a partir da qual faremos todas as análises subsequentes.

9.1 Equação de Lyapunov

Tendo em mãos a equação mestra que nos dá a dinâmica do sistema, desejamos agora resolvê-la para, então, extrair as grandezas de interesse para que possamos analisar os fenômenos de transporte, tais como os fluxos de energia e partículas ao longo da cadeia. Entretanto, para uma cadeia de *spins* composta por L partículas, o operador densidade ρ do sistema possui 2^{2L} entradas, cujas dinâmicas são dadas por um conjunto de equações diferenciais acopladas. Sob o ponto de vista numérico, resolver tal conjunto de equações pode ser extremamente custoso, sendo praticamente inviável para tamanhos arbitrariamente grandes.

Esse problema pode ser contornado dada a natureza quadrática do nosso modelo, que nos permite escrever, ao invés de equações para os elementos do operador densidade, um conjunto fechado de equações para as entradas da matriz de covariância $L \times L$:

$$\theta_{\alpha k, \beta q} = \langle \alpha_k^\dagger \beta_q \rangle = \text{Tr}\{\alpha_k^\dagger \beta_q \rho\}, \quad \alpha, \beta \in \{a, b, c\}. \quad (9.1)$$

É conveniente dividir θ em uma estrutura de blocos

$$\theta = \begin{pmatrix} \theta_A & \theta_{AB} & \theta_{AC} \\ \theta_{AB}^\dagger & \theta_B & \theta_{BC} \\ \theta_{AC}^\dagger & \theta_{BC}^\dagger & \theta_C \end{pmatrix}, \quad (9.2)$$

onde o bloco θ_A de dimensões $L_a \times L_a$ possui elementos $\theta_{ak,aq}$, o bloco θ_{AB} de dimensões $L_a \times L_b$ possui elementos $\theta_{ak,bq}$ e etc. Essa estrutura nos permite identificar os blocos correspondentes às covariâncias entre os modos de segmentos distintos da cadeia (blocos fora da diagonal principal) e os blocos correspondentes às covariâncias entre os modos de um mesmo segmento (blocos da diagonal principal).

A evolução de temporal de $\theta_{\alpha k, \beta q}$ é então dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \theta_{\alpha k, \beta q} &= \frac{d}{d\tau} \text{Tr} \{ \alpha_k^\dagger \beta_q \rho \}, \\ &= \text{Tr} \left\{ \alpha_k^\dagger \beta_q \frac{d\rho}{d\tau} \right\}, \\ &= \text{Tr} \left\{ \alpha_k^\dagger \beta_q (-i [\mathcal{H}_{XX}, \rho] + \mathcal{D}_a(\rho) + \mathcal{D}_c(\rho)) \right\}, \\ &= -i \text{Tr} \left\{ \alpha_k^\dagger \beta_q [\mathcal{H}_{XX}, \rho] \right\} + \text{Tr} \left\{ \alpha_k^\dagger \beta_q \mathcal{D}_a(\rho) \right\} + \text{Tr} \left\{ \alpha_k^\dagger \beta_q \mathcal{D}_c(\rho) \right\}, \end{aligned} \quad (9.3)$$

onde usamos a equação mestra (8.81) na passagem da segunda para a terceira linha. Usando agora a propriedade cíclica do traço na última linha da expressão acima, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \theta_{\alpha k, \beta q} &= -i \text{Tr} \left\{ \left[\alpha_k^\dagger \beta_q, \mathcal{H}_{XX} \right] \rho \right\} + \text{Tr} \left\{ \tilde{\mathcal{D}}_a(\alpha_k^\dagger \beta_q) \rho \right\} + \text{Tr} \left\{ \tilde{\mathcal{D}}_c(\alpha_k^\dagger \beta_q) \rho \right\}, \\ \therefore \frac{d}{d\tau} \theta_{\alpha k, \beta q} &= -i \underbrace{\left\langle \left[\alpha_k^\dagger \beta_q, \mathcal{H}_{XX} \right] \right\rangle}_{\text{unitária}} + \underbrace{\left\langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\alpha_k^\dagger \beta_q) \right\rangle + \left\langle \tilde{\mathcal{D}}_c(\alpha_k^\dagger \beta_q) \right\rangle}_{\text{dissipativa}}. \end{aligned} \quad (9.4)$$

Aqui, usamos a definição de valor médio de um observável $\langle O \rangle = \text{Tr} \{ O \rho \}$ e definimos o *dissipador adjunto* do dissipador (8.82)

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{D}}_\alpha(\rho) &= \sum_k 2\gamma_{\alpha,k} (1 - \bar{n}_{\alpha,k}) \left[\alpha_k^\dagger \rho \alpha_k - \frac{1}{2} \{ \alpha_k^\dagger \alpha_k, \rho \} \right] \\ &\quad + 2\gamma_{\alpha,k} \bar{n}_{\alpha,k} \left[\alpha_k \rho \alpha_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \alpha_k \alpha_k^\dagger, \rho \} \right]. \end{aligned} \quad (9.5)$$

Note que $\tilde{\mathcal{D}}_\alpha(\rho) \neq \mathcal{D}_\alpha^\dagger(\rho) = \mathcal{D}_\alpha(\rho)$, pois como vimos na Seção 8.1, $\mathcal{D}_\alpha(\rho)$ é hermitiano. Para obtermos a evolução temporal de θ , devemos calcular os termos provenientes das evoluções unitária e dissipativa presentes na expressão (9.4). Vamos, a seguir, calcular cada um desses

9.1. Equação de Lyapunov

termos separadamente.

Parte Unitária

Para calcularmos o termo proveniente da dinâmica unitária do sistema, vamos utilizar o hamiltoniano $\mathcal{H}_{XX}$ escrito na forma

$$\mathcal{H}_{XX} = \sum_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha} + V_{ab} + V_{bc}, \quad (9.6)$$

sendo $\mathcal{H}_{\alpha}$ dado por (8.76) e V_{ab} e V_{bc} dados por (8.80). Assim, substituindo a expressão acima na parte unitária da expressão (9.4), obtemos

$$\begin{aligned} [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, \mathcal{H}_{XX}] &= \left[\alpha_k^{\dagger} \beta_q, \sum_{\alpha'} \mathcal{H}_{\alpha'} + V_{ab} + V_{bc} \right], \\ &= \left[\alpha_k^{\dagger} \beta_q, \sum_{\alpha'} \mathcal{H}_{\alpha'} \right] + [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, V_{ab}] + [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, V_{bc}], \\ &= \sum_{\alpha'} [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, \mathcal{H}_{\alpha'}] + [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, V_{ab}] + [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, V_{bc}]. \end{aligned} \quad (9.7)$$

Com o auxílio da relação de anticomutação (8.77) e da propriedade de comutadores

$$[AB, CD] = -AC \{D, B\} + A \{C, B\} D - C \{D, A\} B + \{C, A\} DB, \quad (9.8)$$

vamos calcular os três comutadores da expressão (9.7).

O primeiro comutador nos fornece

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha'} [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, \mathcal{H}_{\alpha'}] &= \sum_{\alpha'} \left[\alpha_k^{\dagger} \beta_q, \sum_{k'} \epsilon_{\alpha', k'} (\alpha_{k'}')^{\dagger} \alpha_{k'}' \right], \\ &= \sum_{\alpha'} \sum_{k'} \epsilon_{\alpha', k'} [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, (\alpha_{k'}')^{\dagger} \alpha_{k'}'], \\ &= \sum_{\alpha'} \sum_{k'} \epsilon_{\alpha', k'} [\alpha_k^{\dagger} \alpha_{k'}' \delta_{k', q} \delta_{\alpha', \beta} - (\alpha_{k'}')^{\dagger} \beta_q \delta_{k', k} \delta_{\alpha', \alpha}], \\ &= \sum_{\alpha'} [\epsilon_{\alpha', q} \alpha_k^{\dagger} \alpha_{q'}' \delta_{\alpha', \beta} - \epsilon_{\alpha', k} (\alpha_k')^{\dagger} \beta_q \delta_{\alpha', \alpha}], \\ &= \sum_{\alpha'} [\theta_{\alpha k, \alpha' q} (W_0)_{\alpha' q, \beta q} - (W_0)_{\alpha k, \alpha' k} \theta_{\alpha' k, \beta k}], \\ &= \theta W_0 - W_0 \theta, \\ \therefore \sum_{\alpha'} [\alpha_k^{\dagger} \beta_q, \mathcal{H}_{\alpha'}] &= [\theta, W_0], \end{aligned} \quad (9.9)$$

Capítulo 9. Resultados e Análises

onde definimos a matriz diagonal em estrutura de blocos $W_0 = \text{diag}(\epsilon_{a,k}, \epsilon_{b,k}, \epsilon_{c,k})$.

O segundo e o terceiro comutador resultam, respectivamente, em

$$\begin{aligned}
 [\alpha_k^\dagger \beta_q, V_{ab}] &= \left[\alpha_k^\dagger \beta_q, -g \sum_{k',q'} S_{La,k'}^a S_{1,q'}^b (a_{k'}^\dagger b_{q'} + b_{q'}^\dagger a_{k'}) \right], \\
 &= -g \sum_{k',q'} S_{La,k'}^a S_{1,q'}^b [\alpha_k^\dagger \beta_q, a_{k'}^\dagger b_{q'} + b_{q'}^\dagger a_{k'}], \\
 &= -g \sum_{k',q'} S_{La,k'}^a S_{1,q'}^b \{ [\alpha_k^\dagger \beta_q, a_{k'}^\dagger b_{q'}] + [\alpha_k^\dagger \beta_q, b_{q'}^\dagger a_{k'}] \}, \\
 &= -g \sum_{k',q'} S_{La,k'}^a S_{1,q'}^b \{ \alpha_k^\dagger b_{q'} \delta_{k',q} \delta_{a,\beta} - a_{k'}^\dagger \beta_q \delta_{q',k} \delta_{b,\alpha} \\
 &\quad - b_{q'}^\dagger \beta_q \delta_{k',k} \delta_{a,\alpha} + \alpha_k^\dagger a_{k'} \delta_{q',q} \delta_{b,\beta} \}, \\
 &= -g \left\{ \sum_{q'} [(S_{ab})_{q,q'} \theta_{ak,bq'} \delta_{a,\beta} - (S_{ab})_{k,q'} \theta_{bq',\beta q} \delta_{a,\alpha}] \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{k'} [(S_{ab})_{k',k} \theta_{ak',\beta q} \delta_{b,\alpha} - (S_{ab})_{k',q} \theta_{\alpha k,ak'} \delta_{b,\beta}] \right\},
 \end{aligned} \tag{9.10}$$

e, analogamente,

$$\begin{aligned}
 [\alpha_k^\dagger \beta_q, V_{bc}] &= \left[\alpha_k^\dagger \beta_q, -g \sum_{q',k'} S_{Lb,q'}^b S_{1,k'}^c (b_{q'}^\dagger c_{k'} + c_{k'}^\dagger b_{q'}) \right], \\
 &= -g \sum_{q',k'} S_{Lb,q'}^b S_{1,k'}^c [\alpha_k^\dagger \beta_q, b_{q'}^\dagger c_{k'} + c_{k'}^\dagger b_{q'}], \\
 &= -g \sum_{q',k'} S_{Lb,q'}^b S_{1,k'}^c \{ [\alpha_k^\dagger \beta_q, b_{q'}^\dagger c_{k'}] + [\alpha_k^\dagger \beta_q, c_{k'}^\dagger b_{q'}] \}, \\
 &= -g \sum_{q',k'} S_{Lb,q'}^b S_{1,k'}^c \{ \alpha_k^\dagger b_{q'} \delta_{k',q} \delta_{c,\beta} - c_{k'}^\dagger \beta_q \delta_{q',k} \delta_{b,\alpha} \\
 &\quad - b_{q'}^\dagger \beta_q \delta_{k',k} \delta_{c,\alpha} + \alpha_k^\dagger c_{k'} \delta_{q',q} \delta_{b,\beta} \}, \\
 &= -g \left\{ \sum_{q'} [(S_{bc})_{q',q} \theta_{ak,bq'} \delta_{c,\beta} - (S_{bc})_{q',k} \theta_{bq',\beta q} \delta_{c,\alpha}] \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{k'} [(S_{bc})_{k,k'} \theta_{ck',\beta q} \delta_{b,\alpha} - (S_{bc})_{q,k'} \theta_{\alpha k,ck'} \delta_{b,\beta}] \right\}.
 \end{aligned} \tag{9.11}$$

9.1. Equação de Lyapunov

Aqui, definimos as matrizes retangulares S_{ab} ($L_a \times L_b$) e S_{bc} ($L_b \times L_c$), cujas entradas são

$$(S_{ab})_{k,q} = S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b, \quad (S_{bc})_{q,k} = S_{L_b,q}^b S_{1,k}^c. \quad (9.12)$$

Separando os casos na expressão (9.10), temos

$$\begin{aligned} & \alpha = a, \beta = a, \\ & \sum_{q'} \left[(S_{ab})_{q,q'} \theta_{ak,bq'} - (S_{ab})_{k,q'} \theta_{bq',aq} \right] = \theta_{AB} S_{ab}^T - S_{ab} \theta_{AB}^\dagger; \\ & \alpha = a, \beta = b, \\ & - \sum_{q'} \left[(S_{ab})_{k,q'} \theta_{bq',bq} \right] + \sum_{k'} \left[(S_{ab})_{k',q} \theta_{ak,ak'} \right] = -S_{ab} \theta_B + \theta_A S_{ab}; \\ & \alpha = a, \beta = c, \\ & - \sum_{q'} \left[(S_{ab})_{k,q'} \theta_{bq',cq} \right] = -S_{ab} \theta_{BC}; \\ & \alpha = b, \beta = a, \\ & \sum_{q'} \left[(S_{ab})_{q,q'} \theta_{bk,bq'} \right] - \sum_{k'} \left[(S_{ab})_{k',k} \theta_{ak',aq} \right] = \theta_B S_{ab}^T - S_{ab}^T \theta_A; \\ & \alpha = b, \beta = b, \\ & - \sum_{k'} \left[(S_{ab})_{k',k} \theta_{ak',bq} - (S_{ab})_{k',q} \theta_{bk,ak'} \right] = -S_{ab}^T \theta_{AB} + \theta_{AB}^\dagger S_{ab}; \\ & \alpha = b, \beta = c, \\ & - \sum_{k'} \left[(S_{ab})_{k',k} \theta_{ak',cq} \right] = -S_{ab}^T \theta_{AC}; \\ & \alpha = c, \beta = a, \\ & \sum_{q'} \left[(S_{ab})_{q,q'} \theta_{ck,bq'} \right] = \theta_{bc}^\dagger S_{ab}^T; \\ & \alpha = c, \beta = b, \\ & \sum_{k'} \left[(S_{ab})_{k',q} \theta_{ck,ak'} \right] = \theta_{AC}^\dagger S_{ab}; \\ & \alpha = c, \beta = c, \\ & 0. \end{aligned} \quad (9.13)$$

Analogamente, a expressão (9.11) nos fornece

$$\begin{aligned}
 & \alpha = a, \beta = a, \\
 & 0; \\
 & \alpha = a, \beta = b, \\
 & \sum_{k'} [(S_{bc})_{q,k'} \theta_{ak,ck'}] = \theta_{AC} S_{bc}^T; \\
 & \alpha = a, \beta = c, \\
 & \sum_{q'} [(S_{bc})_{q',q} \theta_{ak,bq'}] = \theta_{AB} S_{bc}; \\
 & \alpha = b, \beta = a, \\
 & - \sum_{k'} [(S_{bc})_{k,k'} \theta_{ck',aq}] = -S_{bc} \theta_{AC}^\dagger; \\
 & \alpha = b, \beta = b, \\
 & - \sum_{k'} [(S_{bc})_{k,k'} \theta_{ck',bq} - (S_{bc})_{q,k'} \theta_{bk,ck'}] = -S_{bc} \theta_{BC}^\dagger + \theta_{BC} S_{bc}^T; \\
 & \alpha = b, \beta = c, \\
 & \sum_{q'} [(S_{bc})_{q',q} \theta_{bk,bq'}] - \sum_{k'} [(S_{bc})_{k,k'} \theta_{ck',cq}] = \theta_B S_{bc} - S_{bc} \theta_C; \\
 & \alpha = c, \beta = a, \\
 & - \sum_{q'} [(S_{bc})_{q',k} \theta_{bq',aq}] = -S_{bc}^T \theta_{AB}^\dagger; \\
 & \alpha = c, \beta = b, \\
 & - \sum_{q'} [(S_{bc})_{q',k} \theta_{bq',bq}] + \sum_{k'} [(S_{bc})_{q,k'} \theta_{ck,ck'}] = -S_{bc}^T \theta_B + \theta_C S_{bc}^T; \\
 & \alpha = c, \beta = c, \\
 & \sum_{q'} [(S_{bc})_{q',q} \theta_{ck,bq'} - (S_{bc})_{q',k} \theta_{bq',cq}] = \theta_{BC}^\dagger S_{bc} - S_{bc}^T \theta_{BC}.
 \end{aligned} \tag{9.14}$$

9.1. Equação de Lyapunov

Podemos sintetizar os resultados (9.13) e (9.14) na forma matricial

$$\begin{pmatrix} \theta_{AB} S_{ab}^T & \theta_A S_{ab} + \theta_{AC} S_{bc}^T & \theta_{AB} S_{bc} \\ \theta_B S_{ab}^T & \theta_{AB}^\dagger S_{ab} + \theta_{BC} S_{bc}^T & \theta_B S_{bc} \\ \theta_{BC}^\dagger S_{ab}^T & \theta_{AC}^\dagger S_{ab} + \theta_C S_{bc}^T & \theta_{BC}^\dagger S_{bc} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} S_{ab} \theta_{AB}^\dagger & S_{ab} \theta_B & S_{ab} \theta_{BC} \\ S_{ab}^T \theta_A + S_{bc} \theta_{AC}^\dagger & S_{ab}^T \theta_{AB} + S_{bc} \theta_{BC}^\dagger & S_{ab}^T \theta_{AC} + S_{bc} \theta_C \\ S_{bc}^T \theta_{AB}^\dagger & S_{bc}^T \theta_B & S_{bc}^T \theta_{BC} \end{pmatrix}. \quad (9.15)$$

A expressão (9.15) pode ser identificada como

$$\theta W_1 - W_1 \theta = [\theta, W_1], \quad W_1 = \begin{pmatrix} 0 & S_{ab} & 0 \\ S_{ab}^T & 0 & S_{bc} \\ 0 & S_{bc}^T & 0 \end{pmatrix}, \quad (9.16)$$

onde a matriz θ é dada na expressão (9.2).

Combinando os resultados (9.9) e (9.16), temos que a parte unitária da equação (9.4) é dada, portanto, por

$$\begin{aligned} \langle [\alpha_k^\dagger \beta_q, \mathcal{H}_{XX}] \rangle &= -i \{ [\theta, W_0] - g [\theta, W_1] \}, \\ &= -i [\theta, W_0 - g W_1], \\ \therefore \langle [\alpha_k^\dagger \beta_q, \mathcal{H}_{XX}] \rangle &= -i [\theta, W], \end{aligned} \quad (9.17)$$

onde $W = W_0 - g W_1$.

Parte Dissipativa

Antes de calcularmos a parte dissipativa da expressão (9.4), é interessante que a reescrevamos como

$$\tilde{\mathcal{D}}(\alpha_k^\dagger \beta_q) = \tilde{\mathcal{D}}_a(\alpha_k^\dagger \beta_q) + \tilde{\mathcal{D}}_c(\alpha_k^\dagger \beta_q) = \sum_{\alpha'} \tilde{\mathcal{D}}_{\alpha'}(\alpha_k^\dagger \beta_q). \quad (9.18)$$

Uma vez que os dissipadores (e seus respectivos adjuntos) atuam somente nos segmentos A e C da cadeia, basta definirmos o acoplamento $\gamma_{b,k} \equiv 0$ na expressão (9.5), de forma que $\tilde{\mathcal{D}}_b(\alpha_k^\dagger \beta_q) \equiv 0$ e a expressão (9.18) seja válida.

Substituindo então o dissipador adjunto (9.5) na expressão (9.18) e usando novamente as

relações de anticomutação (8.77), obtemos

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{D}}(\alpha_k^\dagger \beta_q) &= \sum_{\alpha'} \sum_{k'} \left\{ 2\gamma_{\alpha',k'}(1 - \bar{n}_{\alpha',k'}) \left[(\alpha_{k'}')^\dagger \alpha_k^\dagger \beta_q \alpha_{k'}' - \frac{1}{2} \{ (\alpha_{k'}')^\dagger \alpha_{k'}', \alpha_k^\dagger \beta_q \} \right] \right. \\
 &\quad \left. + 2\gamma_{\alpha',k'} \bar{n}_{\alpha',k'} \left[\alpha_{k'}' \alpha_k^\dagger \beta_q (\alpha_{k'}')^\dagger - \frac{1}{2} \{ \alpha_{k'}' (\alpha_{k'}')^\dagger, \alpha_k^\dagger \beta_q \} \right] \right\}, \\
 &= \sum_{\alpha'} \sum_{k'} \left\{ -\gamma_{\alpha',k'} \left[(\alpha_{k'}')^\dagger \beta_q \delta_{k',k} \delta_{\alpha',\alpha} + \alpha_k^\dagger \alpha_{k'}' \delta_{k',q} \delta_{\alpha',\beta} \right] \right. \\
 &\quad \left. + 2\gamma_{\alpha',k'} \bar{n}_{\alpha',k'} \delta_{k',k} \delta_{\alpha',\alpha} \delta_{k',q} \delta_{\alpha',\beta} \right\}, \\
 &= \sum_{\alpha'} \left\{ - \left[\gamma_{\alpha',k} (\alpha_k')^\dagger \beta_q \delta_{\alpha',\alpha} + \gamma_{\alpha',q} \alpha_k^\dagger \alpha_q' \delta_{\alpha',\beta} \right] \right. \\
 &\quad \left. + 2\gamma_{\alpha',k} \bar{n}_{\alpha',k} \delta_{k,q} \delta_{\alpha',\alpha} \delta_{\alpha',\beta} \right\}, \\
 &= - \sum_{\alpha'} \left[\Gamma_{\alpha k, \alpha' k} \theta_{\alpha' k, \beta q} + \theta_{\alpha k, \alpha' q} \Gamma_{\alpha' q, \beta q} \right] + 2\gamma_{\alpha, k} \bar{n}_{\alpha, k} \delta_{k, q} \delta_{\alpha, \beta}, \\
 &= -(\Gamma \theta + \theta \Gamma) + 2D, \\
 \therefore \tilde{\mathcal{D}}(\alpha_k^\dagger \beta_q) &= -\{\Gamma, \theta\} + 2D,
 \end{aligned} \tag{9.19}$$

sendo as matrizes diagonais $\Gamma = \text{diag}(\gamma_{a,k}, 0, \gamma_{c,k})$ e $D = \text{diag}(\gamma_{a,k} \bar{n}_{a,k}, 0, \gamma_{c,k} \bar{n}_{c,k})$.

Utilizando, por fim, os resultados (9.17) e (9.19), obtemos a equação de evolução temporal para a matriz de covariância θ :

$$\frac{d\theta}{d\tau} = i[W, \theta] - \{\Gamma, \theta\} + 2D. \tag{9.20}$$

Estamos particularmente interessados no estado estacionário da equação (9.20), de maneira que $d\theta/d\tau = 0$. Assim, temos

$$\{\Gamma, \theta\} - i[W, \theta] = 2D. \tag{9.21}$$

A equação (9.21) pode ainda ser reescrita como

$$\begin{aligned}
 \{\Gamma, \theta\} - i[W, \theta] &= 2D, \\
 \Gamma \theta + \theta \Gamma - i(W \theta - \theta W) &= 2D, \\
 (\Gamma - iW) \theta + \theta (\Gamma + iW) &= 2D, \\
 A \theta + \theta A^\dagger &= 2D,
 \end{aligned} \tag{9.22}$$

onde $A = \Gamma - iW$. A equação (9.22) é conhecida como *equação de Lyapunov*. Essa equação, apesar de não possuir uma solução analítica trivial, pode ser resolvida numericamente através de eficientes bibliotecas, como aquelas presentes nos *softwares* MATHEMATICA e MATLAB, por

9.2. Solução Numérica

exemplo.

A seguir, vamos discutir algumas soluções numéricas da equação (9.22) a fim de termos uma visão geral da estrutura da matriz de covariância θ , além de verificarmos algumas de suas propriedades. Em seguida, vamos apresentar uma solução analítica para a mesma equação, considerando o regime $g \ll t$.

9.2 Solução Numérica

Apesar do foco principal deste trabalho ser a proposição de uma solução analítica para a equação de Lyapunov (9.22) e, a partir dela, analisar os fenômenos de transporte ao longo do sistema, é interessante apresentarmos, antes, algumas soluções numéricas para tal equação. Essas soluções, além de nos fornecerem algum *insight* sobre a física envolvida no problema, nos permitem justificar as aproximações que serão feitas para a obtenção da solução analítica. Além disso, todos os resultados analíticos que serão apresentados posteriormente foram cuidadosamente e extensivamente ratificados por soluções numéricas, como as que serão apresentadas a seguir.

Sistema em Equilíbrio

O primeiro caso que vamos considerar aqui é o sistema em equilíbrio, ou seja, vamos escolher as temperaturas e potenciais químicos do sistema tais que $T_a = T_c \equiv T_0$ e $\mu_a = \mu_c \equiv \mu_0$. Além disso, é interessante olharmos também para a matriz de covariância no espaço real ϑ , relacionada à matriz de covariância θ no espaço de Fourier pela transformação

$$\vartheta = S \theta S, \quad S = \text{diag}(S^a, S^b, S^c), \quad (9.23)$$

sendo S^α , com $\alpha \in \{a, b, c\}$, a matriz de transformação de cada bloco definida na expressão (8.75). No espaço real, o elemento da matriz de covariância $\vartheta_{\alpha m, \beta n}$ nos dá a correlação espacial entre os sítios m e n dos blocos α e β , respectivamente, o que torna a interpretação dos resultados mais simples. A Figura 9.1 mostra as matrizes θ e ϑ para uma cadeia composta por $L = 150$ spins.

A primeira característica a ser notada é a simetria presente nas matrizes, principalmente nas partes imaginárias que estão representadas nas figuras 9.1(b) (matriz ϑ) e 9.1(d) (matriz θ). Essa simetria ocorre justamente pelo fato das matrizes de covariância (tanto no espaço real quanto no espaço de Fourier) serem hermitianas. Já nas partes reais, representadas nas figuras 9.1(a) e 9.1(c), temos a presença de termos não-nulos na diagonal principal. Isso ocorre porque esses

Figura 9.1: Representação das partes real (a) e imaginária (b) da matriz de covariância ϑ . Parte real (c) e parte imaginária (d) da matriz de covariância θ . As matrizes estão representadas em estrutura de blocos, A , B e C , de tamanhos $L_a = L_b = L_c = 50$. Os parâmetros utilizados foram $T_0 = 0.05$, $\mu_0 = 0$, $h = 0$, $g = 1$, $t = 1$ e $\gamma = 0.01$.

elementos correspondem às probabilidades de ocupação, dos sítios na representação coordenada e dos modos normais na representação dos momentos.

Ainda em relação aos elementos da diagonal principal, vemos que o número médio de ocupação de cada sítio na representação coordenada é constante e igual a $n_\ell = 0.5$. Recapitulando a expressão (7.32) para a magnetização por sítio da cadeia XX

$$m = \frac{2}{L} \sum_{\ell=1}^L n_\ell - 1, \quad (9.24)$$

sendo n_ℓ a ocupação do ℓ -ésimo sítio, obtemos facilmente que $m = 0$. Esse resultado é esperado, uma vez que consideramos, nesse caso, que o campo magnético h que atua no sistema é nulo, tornando a cadeia completamente desmagnetizada.

Ná representação dos momentos vemos que, em cada segmento da cadeia, aproximadamente

9.2. Solução Numérica

metade dos modos está ocupada ($\bar{n}_{\alpha,k} = 1$) enquanto a outra metade está desocupada ($\bar{n}_{\alpha,k} = 0$). Isso fica evidente se olharmos, por exemplo, para os elementos diagonais do bloco B , mostrado na figura [Figura 9.2](#). Vemos que os modos estão ocupados até o momento de Fermi $k = \pi/2$, a

Figura 9.2: Número de ocupação $\bar{n}_{b,k}$ em função do momento k para o segmento B da cadeia. A curva em vermelho representa a distribuição de Fermi-Dirac $\bar{n}_k$.

partir do qual os modos passam a estar praticamente desocupados. Além disso, vemos que os resultados numéricos concordam com a distribuição de Fermi-Dirac $\bar{n}_k$ dado na expressão (8.83), indicando que o sistema se encontra, de fato no estado de equilíbrio térmico de Gibbs.

Por fim, a correlação entre um determinado sítio ou modo normal com os demais elementos da cadeia pode ser melhor analisada se olharmos ao longo de uma coluna (ou linha) específica das matrizes de covariância. A figura [Figura 9.3](#) mostra o valor absoluto dos elementos de matriz $\vartheta_{\ell,L/2}$, $\ell \in \{1, L\}$ e $\theta_{k,\pi/2}$, $k \in \{-\pi, 2\pi\}$. Em ambas as imagens, notamos um decaimento

exponencial da correlação a partir do elemento central, com a presença de pequenas oscilações. Vamos agora discutir o caso em que o sistema está fora do equilíbrio.

Sistema Fora do Equilíbrio

Uma característica interessante a respeito da [Figura 9.1](#) que deixamos de mencionar, é o fato das correlações no bloco B nas imagens (b) e (d) serem nulas, deixando um “buraco” (exceto pelos termos diagonais, que são não-nulos) nas matrizes de covariância. E o motivo pelo qual isso ocorre é justamente o fato do sistema estar em equilíbrio. A fim de verificar esse comportamento, vamos considerar agora que o sistema esteja fora do equilíbrio, escolhendo as temperaturas e potenciais químicos dos reservatórios como sendo $T_a = T_0 + \delta T/2$, $T_c = T_0 - \delta T/2$,

Figura 9.3: Valor absoluto da correlação no espaço coordenado (a) e no espaço de momentos (b) entre seus respectivos elementos centrais e o restante do sistema. As linhas tracejadas separam os segmentos A , B e C da cadeia. Note que subtraímos e somamos π aos valores dos momentos dos segmentos A e C , respectivamente, para representá-los de maneira apropriada no gráfico.

$\mu_a = \mu_0 + \delta\mu/2$ e $\mu_c = \mu_0 - \delta\mu/2$. A Figura 9.4 mostra a parte imaginária do bloco B das matrizes ϑ e θ para algumas combinações dos parâmetros δT e $\delta\mu$. Fica evidente pela figura

Figura 9.4: Parte imaginária do bloco B das matrizes de covariância ϑ (primeira linha) e θ (segunda linha) para algumas combinações dos parâmetros δT e $\delta\mu$. O restante dos parâmetros e o padrão das cores foram os mesmos utilizados na Figura 9.1.

9.2. Solução Numérica

que, quando fora do equilíbrio, a parte imaginária do bloco B da matriz de covariância (em ambas as representações) se torna não-nula. Esses elementos correspondem justamente aos fluxos estacionários que surgem no sistema, conforme veremos mais adiante.

Para encerrarmos nossa breve discussão numérica, vamos verificar como o sistema se comporta em função do parâmetro de acoplamento g . Essa análise é interessante uma vez que a solução analítica proposta neste trabalho considera o regime $g \ll t$, de forma que podemos verificar se tal aproximação é razoável. E a fim de simplificar essa análise, vamos considerar apenas elementos da matriz de covariância no espaço real. Esses elementos, conforme já mencionamos, são proporcionais às probabilidades de ocupação dos sítios e aos fluxos de partículas e de energia ao longo da cadeia. A Figura 9.5 mostra as partes real e imaginária dos elementos de matriz $\vartheta_{L/2, L/2+\ell}$, para $\ell = \{0, 1, 2, 3\}$ em função do parâmetro de acoplamento g . Como é possível observar, a parte real dos elementos (sendo a diagonal principal, a probabilidade

Figura 9.5: Parte real (a) e parte imaginária (b) dos elementos $\vartheta_{L/2, L/2+\ell}$ da matriz de covariância em função do acoplamento g . Os demais parâmetros utilizados foram $T_0 = 0.05$, $\delta T = 0.1$, $\mu_0 = 0$, $\delta\mu = 0.1$, $h = 0$, $\gamma = 0.01$ e $t = 1$.

de ocupação do sítio $L/2$) não é sensível ao parâmetro g . Já as partes imaginárias, presentes apenas nos elementos fora da diagonal principal, apresentam um decaimento suave a zero à medida que $g \rightarrow 0$. Todos os demais elementos da matriz ϑ apresentam um comportamento similar. Isso nos permite concluir que não há nenhum efeito físico novo para $g \sim t$. Enfatizamos ainda que muitas outras análises numéricas foram feitas para corroborar essa conclusão, mas que não foram apresentadas aqui por questões de simplicidade.

Feitas as considerações sobre o comportamento do sistema no regime $g \ll t$, vamos agora apresentar a solução analítica para a equação (9.22).

9.3 Solução Perturbativa

Conforme havíamos mencionado na [Seção 9.1](#), a solução analítica da equação de Lyapunov (9.22) para tamanhos arbitrários não é trivial. Entretanto, podemos tratar o problema analiticamente se assumirmos que $g \ll t$ e expandirmos a matriz de covariância θ em potências de g :

$$\theta = \theta_0 + g\theta_1 + g^2\theta_2 + \dots \quad (9.25)$$

É conveniente considerarmos, para a solução analítica, a equação de Lyapunov na forma (9.21). Dessa forma, definindo o operador linear matricial

$$\Upsilon(\theta) = \{\Gamma, \theta\} - i[W_0, \theta], \quad (9.26)$$

a equação supracitada se torna

$$\Upsilon(\theta) = 2D - ig[W_1, \theta], \quad (9.27)$$

lembrando que $W = W_0 - gW_1$. Substituindo então a expressão (9.25) na equação (9.27) acima, obtemos

$$\begin{aligned} \Upsilon(\theta) &= 2D - ig[W_1, \theta], \\ \Upsilon(\theta_0 + g\theta_1 + g^2\theta_2 + \dots) &= 2D - ig[W_1, \theta_0 + g\theta_1 + g^2\theta_2 + \dots], \\ \Upsilon(\theta_0) + g\Upsilon(\theta_1) + g^2\Upsilon(\theta_2) + \dots &= 2D - ig[W_1, \theta_0] - ig^2[W_1, \theta_1] - ig^3[W_1, \theta_2] + \dots \end{aligned} \quad (9.28)$$

Fazendo a equivalência entre os termos de mesma potência de g na equação anterior, obtemos o seguinte conjunto de equações lineares:

$$\Upsilon(\theta_0) = 2D, \quad (9.29a)$$

$$\Upsilon(\theta_1) = -i[W_1, \theta_0], \quad (9.29b)$$

$$\Upsilon(\theta_2) = -i[W_1, \theta_1], \quad (9.29c)$$

etc. Essas equações podem ser resolvidas sequencialmente. Conforme discutimos na [Seção 9.2](#) através de análises numéricas, não há nenhum efeito físico relevante para valores de $g \sim t$. Portanto, iremos nos restringir, por simplicidade, apenas aos termos de até primeira ordem em g .

Uma maneira mais simples de lidar com as equações matriciais (9.29) é usando a notação

9.3. Solução Perturbativa

de produtos externos, que pode ser introduzida definindo-se a base¹ $\{|\alpha, k\rangle\}$, com $\alpha \in \{a, b, c\}$ e $k = \{\pi/L_\alpha + 1, \dots, L_\alpha \pi/L_\alpha + 1\}$. Com isso, podemos escrever todas as matrizes que aparecem nas expressões (9.26) e (9.27) em termos dos produtos externos $|\alpha, k\rangle\langle\beta, q|$. As matrizes diagonais $W_0 = \text{diag}(\epsilon_{a,k}, \epsilon_{b,k}, \epsilon_{c,k})$, $\Gamma = \text{diag}(\gamma_{a,k}, 0, \gamma_{c,k})$ e $D = \text{diag}(\gamma_{a,k} \bar{n}_{a,k}, 0, \gamma_{c,k} \bar{n}_{c,k})$, por exemplo, se tornam

$$W_0 = \sum_{\alpha, k} \epsilon_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|, \quad (9.30)$$

$$\Gamma = \sum_{\alpha, k} \gamma_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|, \quad (9.31)$$

$$D = \sum_{\alpha, k} \gamma_{\alpha, k} \bar{n}_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|. \quad (9.32)$$

De forma análoga, a matriz de covariância θ , definida na expressão (9.1), pode ser escrita nessa notação introduzindo-se duas relações de completeza:

$$\theta = \sum_{\substack{\alpha, k \\ \beta, q}} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k| \theta |\beta, q\rangle\langle\beta, q| = \sum_{\substack{\alpha, k \\ \beta, q}} \theta_{\alpha k, \beta q} |\alpha, k\rangle\langle\beta, q|, \quad (9.33)$$

onde $\langle\alpha, k| \theta |\beta, q\rangle \equiv \theta_{\alpha k, \beta q}$. Assim, o operador $\Upsilon(\theta)$ na equação (9.27) pode ser escrito como

$$\Upsilon(\theta) = \sum_{\substack{\alpha, k \\ \beta, q}} \left[\gamma_{\alpha, k} + \gamma_{\beta, q} - i(\epsilon_{\alpha, k} - \epsilon_{\beta, q}) \right] \theta_{\alpha k, \beta q} |\alpha, k\rangle\langle\beta, q|, \quad (9.34)$$

onde $\gamma_{a,k} = \gamma_{c,k} \equiv \gamma$ e $\gamma_{b,k} = 0$.

Com esses resultados em mãos, podemos resolver prontamente a equação de ordem zero (9.29a). Uma vez que a matriz D é diagonal, $\Upsilon(\theta_0)$ também deve ser. Assim, considerando $\alpha = \beta$ e $k = q$ no lado esquerdo da equação, temos

$$\begin{aligned} \Upsilon(\theta_0) &= 2D, \\ 2 \sum_{\alpha, k} \gamma_{\alpha, k} (\theta_0)_{\alpha k, \alpha k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k| &= 2 \sum_{\alpha, k} \gamma_{\alpha, k} \bar{n}_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|, \\ \therefore (\theta_0)_{\alpha k, \alpha k} &= \bar{n}_{\alpha, k}. \end{aligned} \quad (9.35)$$

Logo,

$$\theta_0 = \sum_{\alpha, k} \bar{n}_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|, \quad (9.36)$$

¹A utilização da notação de Dirac não é absolutamente necessária, mas é bastante conveniente.

onde $\bar{n}_{\alpha,k}$ é dado pela distribuição de Fermi-Dirac, conforme a expressão (8.83). Entretanto, uma vez que o segmento B não está em contato com nenhum reservatório, seu número de ocupação médio $\bar{n}_{b,q}$ permanece indeterminado em θ_0 . Como veremos mais adiante, essas ocupações podem ser determinadas a partir da solução de primeira ordem θ_1 dada pela equação (9.29b).

Nosso próximo passo consiste, justamente, em resolver a equação de primeira ordem para θ_1 , citada acima. Nesse caso, porém, é interessante separarmos a solução em dois casos específicos: o caso $L_b \neq 0$ (conforme a Figura 6.1b) e o caso $L_b = 0$ (conforme a Figura 6.1c). Vamos começar com o segundo caso (e também o mais simples).

Solução para $L_b = 0$

Quando $L_b = 0$, todas as fórmulas anteriores para as matrizes W_0 , Γ , D e θ_0 continuam válidas, porém agora para $\alpha \in \{a, c\}$. Além disso, para resolvermos a equação (9.29b), precisamos escrever o comutador $[W_1, \theta_0]$ na notação de produto externo. Antes, porém, é preciso modificar a matriz W_1 , dada na expressão (9.16), uma vez que o segmento B , neste caso, não existe. Logo, a matriz W_1 se torna:

$$W_1 = \begin{pmatrix} 0 & S_{ab} & 0 \\ S_{ab}^T & 0 & S_{bc} \\ 0 & S_{bc}^T & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow W_1 = \begin{pmatrix} 0 & S_{ac} \\ S_{ac}^T & 0 \end{pmatrix}, \quad (9.37)$$

sendo $(S_{ac})_{k,q} = S_{L_a,k}^a S_{1,q}^c$ uma matriz retangular de dimensões $L_a \times L_c$ e S^α são as matrizes de transformação definidas na expressão (8.75). Na notação de produto externo, a matriz W_1 dada na expressão (9.37) é, então, escrita como

$$W_1 = \sum_{k,q} (S_{ac})_{k,q} |a,k\rangle \langle c,q| + \text{trans}, \quad (9.38)$$

9.3. Solução Perturbativa

onde “trans” significa transposto. Assim, usando o resultado acima juntamente com a expressão (9.36) para θ_0 , o comutador $[W_1, \theta_0]$ pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
 [W_1, \theta_0] &= W_1 \theta_0 - \theta_0 W_1, \\
 &= \sum_{k,q} \sum_{\alpha,k'} (S_{ac})_{k,q} [\bar{n}_{\alpha,k'} |a,k\rangle \langle c,q | \alpha,k'\rangle \langle \alpha,k'| \\
 &\quad - \bar{n}_{\alpha,k'} | \alpha,k'\rangle \langle \alpha,k' | a,k\rangle \langle c,q|] + \text{trans}, \\
 &= \sum_{k,q} \sum_{\alpha,k'} (S_{ac})_{k,q} [\bar{n}_{\alpha,k'} \delta_{\alpha,c} \delta_{k',q} |a,k\rangle \langle \alpha,k'| \\
 &\quad - \bar{n}_{\alpha,k'} \delta_{\alpha,a} \delta_{k',k} | \alpha,k'\rangle \langle c,q|] + \text{trans}, \\
 \therefore [W_1, \theta_0] &= \sum_{k,q} (S_{ac})_{k,q} (\bar{n}_{c,q} - \bar{n}_{a,k}) |a,k\rangle \langle c,q| + \text{trans}.
 \end{aligned} \tag{9.39}$$

Substituindo agora o resultado anterior juntamente com a expressão (9.34) na equação (9.29b), obtemos

$$\begin{aligned}
 \sum_{\substack{\alpha,k \\ \beta,q}} [\gamma_{\alpha,k} + \gamma_{\beta,q} - i(\epsilon_{\alpha,k} - \epsilon_{\beta,q})] (\theta_1)_{\alpha k, \beta q} | \alpha,k\rangle \langle \beta,q| \\
 = -i \left[\sum_{k,q} (S_{ac})_{k,q} (\bar{n}_{c,q} - \bar{n}_{a,k}) |a,k\rangle \langle c,q| + \text{trans} \right].
 \end{aligned} \tag{9.40}$$

Comprando os membros da equação acima, concluímos imediatamente que o lado esquerdo será equivalente ao direito apenas para $\alpha = a$ e $\beta = c$ (e $\alpha = c$ e $\beta = a$, para o transposto). Os demais casos serão todos nulos. Logo, temos que

$$\begin{aligned}
 [\gamma_{a,k} + \gamma_{c,q} - i(\epsilon_{a,k} - \epsilon_{c,q})] (\theta_1)_{ak,cq} &= -i(S_{ac})_{k,q} (\bar{n}_{c,q} - \bar{n}_{a,k}), \\
 \therefore (\theta_1)_{ak,cq} &= i \frac{(S_{ac})_{k,q} (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,q})}{\gamma_{a,k} + \gamma_{c,q} - i(\epsilon_{a,k} - \epsilon_{c,q})}.
 \end{aligned} \tag{9.41}$$

Lembrando que estamos adotando $\gamma_{a,k} = \gamma_{c,k} \equiv \gamma$ e recuperando a definição $(S_{ac})_{k,q} = S_{La,k}^a S_{1,q}^c$ concluímos, portanto, que

$$\theta_1 = i \frac{S_{La,k}^a S_{1,q}^c (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,q})}{2\gamma - i(\epsilon_{a,k} - \epsilon_{c,q})} |a,k\rangle \langle c,q| + \text{h.c.}, \tag{9.42}$$

onde “h.c.” é o hermitiano conjugado. Em termos de estrutura de blocos, o termo na expressão acima corresponde ao bloco θ_{AC} na matriz de covariância. Já o seu hermitiano conjugado, corresponde ao bloco $\theta_{CA} = \theta_{AC}^\dagger$. A matriz de covariância completa é, então, dada por $\theta = \theta_0 + g\theta_1$, sendo θ_0 dado na expressão (9.36) e θ_1 dado na expressão (9.42).

Solução para $L_b \neq 0$

Vamos agora considerar o caso $L_b \neq 0$. Assim, temos novamente que $\alpha \in \{a, b, c\}$. Todas as matrizes anteriores, incluindo a solução de ordem zero, θ_0 , continuam válidas. A fim de resolvermos a equação (9.29b) devemos, portanto, calcular o comutador $[W_1, \theta_0]$. Na notação de produto externo a matriz W_1 , nesse caso, fica

$$W_1 = (S_{ab})_{k,q} |a,k\rangle\langle b,q| + (S_{bc})_{q,k} |b,q\rangle\langle c,k| + \text{trans}, \quad (9.43)$$

sendo as matrizes retangulares $(S_{ab})_{k,q} = S_{La,k}^a S_{1,q}^b$ e $(S_{bc})_{q,k} = S_{Lb,q}^b S_{1,k}^c$ de dimensões $(L_a \times L_b)$ e $(L_b \times L_c)$, respectivamente. Usando, assim, a expressão (9.43) para W_1 e a expressão (9.36) para θ_0 obtemos, analogamente ao que foi feito na expressão (9.39), o comutador $[W_1, \theta_0]$:

$$[W_1, \theta_0] = \sum_{k,q} \left[(S_{ab})_{k,q} (\bar{n}_{b,q} - \bar{n}_{a,k}) |a,k\rangle\langle b,q| + (S_{bc})_{q,k} (\bar{n}_{c,k} - \bar{n}_{b,q}) |b,q\rangle\langle c,k| + \text{trans} \right]. \quad (9.44)$$

Substituindo o resultado acima juntamente com o operador $\Upsilon(\theta_1)$ na equação (9.29b) obtemos, de maneira semelhante ao resultado (9.41), as entradas não-nulas para a matriz θ_1 :

$$(\theta_1)_{ak,bq} = i \frac{(S_{ab})_{k,q} (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{b,q})}{\gamma_{a,k} + \gamma_{b,q} - i(\epsilon_{a,k} - \epsilon_{b,q})}, \quad (9.45a)$$

$$(\theta_1)_{bq,ck} = i \frac{(S_{bc})_{q,k} (\bar{n}_{b,q} - \bar{n}_{c,k})}{\gamma_{b,q} + \gamma_{c,k} - i(\epsilon_{b,q} - \epsilon_{c,k})}. \quad (9.45b)$$

Novamente, recapitulamos as definições $\gamma_{a,k} = \gamma_{c,k} \equiv \gamma$ e $\gamma_{b,q} \equiv 0$ e explicitamos as matrizes S_{ab} e S_{bc} definidas anteriormente, para obter a matriz θ_1 :

$$\theta_1 = i \frac{S_{La,k}^a S_{1,q}^b (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{b,q})}{\gamma - i(\epsilon_{a,k} - \epsilon_{b,q})} |a,k\rangle\langle b,q| + i \frac{S_{Lb,q}^b S_{1,k}^c (\bar{n}_{b,q} - \bar{n}_{c,k})}{\gamma - i(\epsilon_{b,q} - \epsilon_{c,k})} |b,q\rangle\langle c,k| + \text{h.c.} \quad (9.46)$$

9.3. Solução Perturbativa

Note que, diferente da expressão (9.42) para o caso $L_b = 0$, o denominador da expressão obtida acima depende de γ em seu denominador e não de 2γ . Isso é uma consequência do fato de que $\gamma_{b,q} \equiv 0$.

É interessante notar também que, tanto a expressão (9.42), quanto a (9.46), depende apenas da diferença das energias $\epsilon_{\alpha,k} - \epsilon_{\beta,q}$, dadas por $\epsilon_{\alpha,k} = -h - 2t \cos k$, conforme a expressão (8.76). Dessa forma, o termo constante h referente ao campo magnético é cancelado nos denominadores dessas expressões, permanecendo apenas em seus respectivos números de ocupação de Fermi-Dirac. Portanto, a partir de agora, vamos absorver o termo h na definição dos potenciais químicos, ou seja, $\mu_a + h \rightarrow \mu_a$ e $\mu_c + h \rightarrow \mu_c$, o que é equivalente a definir $h = 0$.

As equações (9.45) e (9.46) continuam dependendo do número de ocupação $\bar{n}_{b,q}$, que ainda não está determinado. Isso pode ser resolvido através da evolução temporal da covariância $\theta_{bq,bq} = \langle b_q^\dagger b_q \rangle$. Usando o resultado (9.4) para $\alpha = \beta = b$ e $k = q$, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \theta_{bq,bq} &= -i \left\langle [b_q^\dagger b_q, \mathcal{H}_{XX}] \right\rangle + \overrightarrow{\langle \tilde{\mathcal{D}}_a(b_q^\dagger b_q) \rangle}^0 + \overrightarrow{\langle \tilde{\mathcal{D}}_e(b_q^\dagger b_q) \rangle}^0 \\ &= -i \left\{ \sum_{\alpha} \overrightarrow{\langle [b_q^\dagger b_q, \mathcal{H}_{\alpha}] \rangle}^0 + \langle [b_q^\dagger b_q, V_{ab}] \rangle + \langle [b_q^\dagger b_q, V_{ab}] \rangle \right\}, \\ &= i \langle [V_{ab}, b_q^\dagger b_q] \rangle + i \langle [V_{bc}, b_q^\dagger b_q] \rangle, \end{aligned} \quad (9.47)$$

onde, na primeira linha, usamos o fato dos dissipadores atuarem apenas nos segmentos A e C da cadeia e, na segunda linha, usamos a propriedade de comutação (9.8) para mostrar que $[b_q^\dagger b_q, a_k^\dagger a_k] = 0 \forall \alpha \in \{a, b, c\}$. Agora, para obtermos os comutadores na terceira linha da expressão (9.47), usamos as definições de V_{ab} e V_{bc} dadas nas expressões (8.80). Assim, temos

$$\begin{aligned} [V_{ab}, b_q^\dagger b_q] &= -g \sum_{k,q'} S_{La,k}^a S_{1,q'}^b \{ [a_k^\dagger b_{q'}, b_q^\dagger b_q] + [b_{q'}^\dagger a_k, b_q^\dagger b_q] \}, \\ &= -g \sum_{k,q'} S_{La,k}^a S_{1,q'}^b \{ a_k^\dagger b_q - b_q^\dagger a_k \} \delta_{q',q}, \\ &= -g \sum_k S_{La,k}^a S_{1,q}^b \{ a_k^\dagger b_q - b_q^\dagger a_k \}, \\ \therefore \langle [V_{ab}, b_q^\dagger b_q] \rangle &= -g \sum_k S_{La,k}^a S_{1,q}^b \{ \theta_{ak,bq} - \theta_{bq,ak} \}, \end{aligned} \quad (9.48)$$

e

$$\begin{aligned}
 [V_{bc}, b_q^\dagger b_q] &= -g \sum_{q',k} S_{L_b,q'}^b S_{1,k}^c \left\{ [b_{q'}^\dagger c_k, b_q^\dagger b_q] + [c_k^\dagger b_{q'}, b_q^\dagger b_q] \right\}, \\
 &= -g \sum_{q',k} S_{L_b,q'}^b S_{1,k}^c \left\{ -b_q^\dagger c_k + c_k^\dagger b_q \right\} \delta_{q',q}, \\
 &= g \sum_k S_{L_b,q}^b S_{1,k}^c \left\{ b_q^\dagger c_k - c_k^\dagger b_q \right\}, \\
 \therefore \langle [V_{bc}, b_q^\dagger b_q] \rangle &= g \sum_k S_{L_b,q}^b S_{1,k}^c \left\{ \theta_{bq,ck} - \theta_{ck,bq} \right\},
 \end{aligned} \tag{9.49}$$

onde usamos novamente a propriedade de comutação (9.8). Com esses resultados a equação (9.47) fica

$$\frac{d}{d\tau} \theta_{bq,bq} = -2ig \sum_k S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \text{Im}[\theta_{ak,bq}] + 2ig \sum_{k'} S_{L_b,q}^b S_{1,k'}^c \text{Im}[\theta_{bq,ck'}] \tag{9.50}$$

em que usamos o fato de que $\theta_{bq,ak} = \theta_{ak,bq}^*$ e $\theta_{ck',bq} = \theta_{bq,ck'}^*$ ou, na representação de blocos, $\theta_{BA} = \theta_{AB}^\dagger$ e $\theta_{CB} = \theta_{BC}^\dagger$. Frisamos que as somas não podem ser fatoradas pois, a princípio, os segmentos A e C possuem comprimentos distintos ($L_a \neq L_c$). No estado estacionário, temos que $d\theta_{bq,bq}/d\tau = 0$. Logo, a equação (9.50) se torna

$$\sum_k S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \text{Im}[\theta_{ak,bq}] = \sum_{k'} S_{L_b,q}^b S_{1,k'}^c \text{Im}[\theta_{bq,ck'}]. \tag{9.51}$$

É importante mencionar que essa igualdade vale para a soma como um todo e não para os elementos individuais. Substituindo agora as expressões (9.45) na equação (9.51) e isolando $\bar{n}_{b,q}$, obtemos

$$\bar{n}_{b,q} = \frac{\sum_k \left[\bar{n}_{a,k} \frac{(S_{L_a,k}^a)^2 (S_{1,q}^b)^2}{\gamma^2 + (\epsilon_{a,k} - \epsilon_{b,q})^2} \right] + \sum_{k'} \left[\bar{n}_{c,k'} \frac{(S_{L_b,q}^b)^2 (S_{1,k'}^c)^2}{\gamma^2 + (\epsilon_{b,q} - \epsilon_{c,k'})^2} \right]}{\sum_k \left[\frac{(S_{L_a,k}^a)^2 (S_{1,q}^b)^2}{\gamma^2 + (\epsilon_{a,k} - \epsilon_{b,q})^2} \right] + \sum_{k'} \left[\frac{(S_{L_b,q}^b)^2 (S_{1,k'}^c)^2}{\gamma^2 + (\epsilon_{b,q} - \epsilon_{c,k'})^2} \right]} \tag{9.52}$$

Usando as definições explícitas das matrizes de transformação $S_{\ell,k}^\alpha = \sqrt{2/L_\alpha+1} \sin(k\ell)$ e das energias $\epsilon_{\alpha,k} = -h - 2t \cos k$, a expressão (9.52) se simplifica à

$$\bar{n}_{b,q} = \frac{\frac{1}{L_a+1} \sum_k \bar{n}_{a,k} f(k,q) + \frac{1}{L_c+1} \sum_{k'} \bar{n}_{c,k'} f(k',q)}{\frac{1}{L_a+1} \sum_k f(k,q) + \frac{1}{L_c+1} \sum_{k'} f(k',q)} \tag{9.53}$$

9.3. Solução Perturbativa

onde definimos

$$f(k, q) = \frac{\sin^2 k}{\gamma^2 + 4t^2(\cos k - \cos q)^2}, \quad (9.54)$$

e fizemos uso da simplificação trigonométrica $\sin^2(L_\alpha k) = \sin^2[(L_\alpha + 1)k - k] = \sin^2 k$, lembrando que $k = n\pi/L_\alpha + 1$, com $n = \{1, \dots, L_\alpha\}$. O resultado (9.53) é fisicamente intuitivo: $\bar{n}_{b,q}$ é dado por uma média ponderada dos números de ocupação dos segmentos A e C da cadeia. Note que esse resultado não depende do tamanho do segmento B , de forma que podemos interpretar q como uma variável contínua no intervalo $[0, \pi]$.

Apesar do resultado anterior ser bastante geral, sendo válido para tamanhos arbitrários dos segmentos A e C , não há nenhum motivo especial que nos leve a considerar casos assimétricos ($L_a \neq L_c$). Assim, a partir de agora, vamos considerar que os segmentos A e C têm a mesma dimensão $L_a = L_c \equiv L_r$. Dessa forma, a expressão (9.53) se torna

$$\bar{n}_{b,q} = \frac{\sum_k f(k, q)(\bar{n}_{a,k} + \bar{n}_{c,k})}{2 \sum_k f(k, q)}. \quad (9.55)$$

Um caso particular importante ocorre quando $L_r = 1$, correspondente à Figura 6.1a. Nesse caso, k assume um único valor: $k = \pi/2$. Consequentemente, a expressão (9.55) se reduz à

$$\bar{n}_{b,q} = \frac{\bar{n}_a + \bar{n}_c}{2}, \quad (9.56)$$

que é independente de q . Esse é o comportamento típico para sistemas balísticos [76, 82]: a ocupação na parte central da cadeia é a média simples das ocupações nas extremidades.

Outro caso particularmente interessante ocorre para $L_b = 1$ (o que implica $q = \pi/2$), correspondente a um único *quantum dot* em contato com dois terminais perfeitamente condutores. Se considerarmos que $T_a = T_c \equiv T$ e que os potenciais químicos estão inversamente polarizados ($\mu_a = -\mu_c \equiv \mu$), então o número médio de ocupação $\bar{n}_b = 1/2$ para qualquer valor de μ . Para mostrar esse resultado, usamos a propriedade da função $f(k, q) = f(\pi - k, q)$ e da energia $\epsilon_{\alpha,k} = \epsilon_\alpha(k) = -\epsilon_\alpha(\pi - k) = -2t \cos k$ (lembrando que o campo magnético h foi absorvido no potencial químico). Isso nos permite restringir a soma na expressão (9.55) ao intervalo $[0, \pi/2]$.

Assim, podemos simplificar o termo

$$\begin{aligned}
 \bar{n}_{a,k} + \bar{n}_{c,k} &= \left[\frac{1}{e^{\frac{\epsilon(k)-\mu}{T}} + 1} + \frac{1}{e^{\frac{\epsilon(\pi-k)-\mu}{T}} + 1} \right] + \left[\frac{1}{e^{\frac{\epsilon(k)+\mu}{T}} + 1} + \frac{1}{e^{\frac{\epsilon(\pi-k)+\mu}{T}} + 1} \right], \\
 &= \left[\frac{1}{e^{\frac{\epsilon(k)-\mu}{T}} + 1} + \frac{1}{e^{\frac{-\epsilon(k)-\mu}{T}} + 1} \right] + \left[\frac{1}{e^{\frac{\epsilon(k)+\mu}{T}} + 1} + \frac{1}{e^{\frac{-\epsilon(k)+\mu}{T}} + 1} \right], \\
 &= \underbrace{\left[\frac{1}{e^{\frac{\epsilon(k)-\mu}{T}} + 1} + \frac{1}{e^{\frac{-\epsilon(k)+\mu}{T}} + 1} \right]}_{=1} + \underbrace{\left[\frac{1}{e^{\frac{\epsilon(k)+\mu}{T}} + 1} + \frac{1}{e^{\frac{-\epsilon(k)-\mu}{T}} + 1} \right]}_{=1}.
 \end{aligned} \tag{9.57}$$

$$\therefore \bar{n}_{a,k} + \bar{n}_{c,k} = 2.$$

onde usamos o fato de que $\epsilon_a(k) = \epsilon_c(k) = \epsilon(k)$. Com esse resultado, a expressão (9.55) se torna

$$\bar{n}_b = \frac{2 \sum_{k=0}^{\pi/2} f(k,q)}{4 \sum_{k=0}^{\pi/2} f(k,q)} = \frac{1}{2}. \tag{9.58}$$

A **Figura 9.6** ilustra os possíveis comportamentos de $\bar{n}_{b,q}$ dado na expressão (9.55), considerando o sistema em equilíbrio, ou seja, $T_a = T_c \equiv T$ e $\mu_a = \mu_c \equiv \mu$. Os parâmetros utilizados

Figura 9.6: (a) Número de ocupação $\bar{n}_{b,q}$ como função de q para alguns valores de γ . O restante dos parâmetros utilizados foram $L_r = 50$, $T = 0.05$, $\mu = 0$ e $t = 1$. (b) Número total de excitação no segmento B , $\langle N_b \rangle / L_b$, como função de μ para alguns valores de γ . Em ambas as imagens, os pontos sólidos representam as ocupações nos segmentos A e C .

foram $T = 0.05t$ e $L_r = 50$. Conforme mencionamos anteriormente, o comprimento L_b não precisa ser especificado explicitamente, uma vez que q pode ser tratada como uma variável contínua no intervalo $[0, \pi]$. A **Figura 9.6a** mostra o número de ocupação $\bar{n}_{b,q}$ de cada modo para $\mu = 0$. Notamos que esse resultado concorda com o resultado numérico mostrado na **Figura 9.2**, para $\gamma = 0.01$. Já a **Figura 9.6b** mostra o número total de ocupação, $N_b = \sum_q \bar{n}_{b,q}$, como função do potencial químico de equilíbrio μ . Essa figura é análoga à **Figura 7.2(a)** para a magnetização

9.3. Solução Perturbativa

da cadeia XX à temperatura zero, no caso em que $\gamma = 0.01$. Isso indica que, de fato, o segmento B da cadeia tende a termalizar corretamente no regime $\gamma/t \ll 1$. Além disso, como podemos verificar em ambas as imagens, quando $\gamma/t \ll 1$, o comportamento do segmento B se torna semelhante aos comportamentos dos segmentos A e C (representados pelos pontos sólidos). Já no regime $\gamma/t \gg 1$, os modos normais se tornam planos, levando a uma distorção da curva $\langle N_b \rangle / L_b$ vs μ . O tamanho $L_r = 50$ foi escolhido para ilustrar alguns dos efeitos de tamanho finito que surgem no problema, nesse caso, manifestados através de pequenas oscilações na curva vermelha da [Figura 9.6a](#). Tais oscilações tendem a desaparecer rapidamente à medida em que L_r aumenta.

Para melhor compreendermos os resultados da [Figura 9.6](#), é conveniente considerar o caso onde os segmentos A e C da cadeia tendem ao limite termodinâmico (enquanto L_b permanece arbitrário). Nesse limite, usamos novamente a conversão de somas em integrais na primeira zona de Brillouin $\sum_k = (L_r/\pi) \int_0^\pi dk$, conforme já mostramos na expressão (7.36). Com isso, as somas presentes na expressão (9.55) serão convertidas em integrais do tipo

$$\mathcal{M} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{M(k)}{\gamma^2 + 4t^2(\cos k - \cos q)^2} dk, \quad (9.59)$$

sendo $M(k)$ uma função arbitrária. Assim, temos $M(k) = \sin^2 k (\bar{n}_{a,k} + \bar{n}_{c,k})/2$ para o numerador e $M(k) = \sin^2 k$ para o denominador da expressão (9.55). Embora a integral (9.59) não possua uma forma analítica para as funções $M(k)$ consideradas, é possível determinar seu comportamento nos regimes $\gamma/t \ll 1$ e $\gamma/t \gg 1$. Nesse último caso, nós simplesmente desprezamos o segundo termo no denominador, de forma a obtermos

$$\mathcal{M} \simeq \frac{1}{\pi\gamma^2} \int_0^\pi M(k) dk, \quad \gamma/t \gg 1. \quad (9.60)$$

Ou seja, o resultado se torna independente de q . Já no regime $\gamma/t \ll 1$, vemos da expressão (9.59) que a contribuição mais importante para a integral provém da região onde $k \sim q$. Nesse caso, a integral pode ser transformada em um problema de contorno, de maneira que podemos usar o teorema dos resíduos para mostrar que

$$\mathcal{M} \simeq \frac{1}{\gamma t} \frac{M(q)}{\sin q}, \quad \gamma/t \ll 1. \quad (9.61)$$

Usando os resultados anteriores na expressão (9.55), obtemos:

$$\bar{n}_{b,q} \simeq \frac{\bar{n}_{a,q} + \bar{n}_{c,q}}{2}, \quad \gamma/t \ll 1, \quad (9.62a)$$

$$\bar{n}_{b,q} \simeq \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \sin^2 k \frac{\bar{n}_{a,k} + \bar{n}_{c,k}}{2} dk, \quad \gamma/t \gg 1. \quad (9.62b)$$

Vemos aqui dois resultados fisicamente bastante distintos. No regime $\gamma/t \ll 1$, $\bar{n}_{b,q}$ tende à simples média aritmética das ocupações de mesmo modo dos segmentos A e C da cadeia. Já no regime $\gamma/t \gg 1$, a ocupação de cada modo $\bar{n}_{b,q}$ tende a uma média ponderada sobre todos os modos dos segmentos A e C, independente de q , conforme observamos na curva verde da [Figura 9.6a](#).

Para finalizarmos, podemos ainda encontrar fórmulas exatas para as expressões (9.62a) e (9.62b) no limite $T \rightarrow 0$. Notamos, para tanto, que nesse limite a distribuição de Fermi-Dirac tende à função de Heaviside $\Theta(x)$, ou seja, $\bar{n}_{\alpha,k} = \Theta(\mu_\alpha - \epsilon_{\alpha,k})$. Definimos também o momento de Fermi a partir da relação $\epsilon_{k_F} = \mu$, que nos dá $k_F = \arccos(-\mu/2t) = \pi - \arccos(\mu/2t)$, analogamente ao que fizemos na expressão (7.30). Assim, as expressões para $\bar{n}_{b,q}$ nos regimes $\gamma/t \ll 1$ e $\gamma/t \gg 1$ se tornam

$$\bar{n}_{b,q} = \Theta[q_F(\mu) - q], \quad \gamma/t \ll 1, \quad (9.63a)$$

$$\bar{n}_{b,q} = C(\mu), \quad \gamma/t \gg 1, \quad (9.63b)$$

onde usamos a equivalência $\Theta(\mu - \epsilon_k) = \Theta[k_F(\mu) - k]$ e

$$\begin{aligned} C(\mu) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \sin^2 k \Theta(\mu - \epsilon_k) dk, \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \sin^2 k \Theta(k_F - k) dk, \\ \therefore C(\mu) &= 1 + \frac{1}{\pi} \left[\frac{\mu}{4t^2} \sqrt{4t^2 - \mu^2} - \arccos\left(\frac{\mu}{2t}\right) \right], \end{aligned} \quad (9.64)$$

e $q_F(\mu) = k_F(\mu) = \pi - \arccos(\mu/2t)$. A partir desses resultados vemos que, para $\mu = 0$, $q_F = k_F = \pi/2$ e, consequentemente, $\bar{n}_{b,q} = \Theta(\pi/2 - q)$ para $\gamma/t \ll 1$ e $\bar{n}_{b,q} = 1/2$ para $\gamma/t \gg 1$, correspondentes respectivamente às curvas vermelha e verde na [Figura 9.6a](#). O número total de ocupação $\langle \mathcal{N}_b \rangle / L_b$ pode ser facilmente calculado a partir dos resultados (9.63a) e (9.63b). Para tanto, fazemos novamente a correspondência $\langle \mathcal{N}_b \rangle = \sum_q \bar{n}_{b,q} = (L_b/\pi) \int \bar{n}_{b,q} dq$. Com

9.4. Fluxo de Partículas

isso, obtemos

$$\langle N_b \rangle / L_b = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \Theta(q_F - q) dq = \frac{1}{\pi} q_F = 1 - \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{\mu}{2t}\right), \quad \gamma/t \ll 1, \quad (9.65a)$$

$$\langle N_b \rangle / L_b = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi C(\mu) dq = C(\mu), \quad \gamma/t \gg 1, \quad (9.65b)$$

que correspondem respectivamente às curvas vermelha e verde na [Figura 9.6\(b\)](#).

9.4 Fluxo de Partículas

A partir dos resultados obtidos na seção anterior para a matriz de covariância θ , vamos agora analisar o fluxo de partículas que surge no sistema quando as temperaturas e/ou potenciais químicos dos dois reservatórios são distintos entre si. Começamos pelos operadores

$$N_\alpha = \sum_k a_k^\dagger a_k, \quad (9.66)$$

que fornece o número total de partículas no segmento α da cadeia e $N = \sum_\alpha N_\alpha = N_a + N_b + N_c$, que representa o número total de partículas em todo o sistema. A evolução temporal de $\langle N \rangle$ pode ser obtida diretamente da equação mestra (8.81), ou mais simplesmente com o auxílio da expressão (9.4). Uma vez que $[\mathcal{H}_{XX}, N] = 0$, a equação de evolução temporal se torna

$$\frac{d\langle N \rangle}{d\tau} = \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(N_a) \rangle + \langle \tilde{\mathcal{D}}_c(N_c) \rangle, \quad (9.67)$$

sendo $\tilde{\mathcal{D}}_\alpha$ o dissipador adjunto, definido na expressão (9.5). A equação (9.67) mostra, portanto, que os reservatórios A e C são os únicos canais pelos quais partículas podem fluir para dentro ou para fora do sistema. No estado estacionário $d\langle N \rangle/d\tau = 0$, de maneira que obtemos

$$J \equiv \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(N_a) \rangle = -\langle \tilde{\mathcal{D}}_c(N_c) \rangle. \quad (9.68)$$

A grandeza J representa, então, o fluxo de partículas através do sistema no estado estacionário. Quando $J > 0$, partículas estão entrando no sistema a partir do reservatório A . Quando $J < 0$, partículas entram no sistema a partir do reservatório C . Note que a corrente elétrica do sistema pode ser obtida multiplicando J pela carga elétrica $-e$.

Usando as definições (9.66) para N_α e (9.5) para $\tilde{\mathcal{D}}_\alpha$ obtemos, após alguns cálculos

semelhantes àqueles feitos em (9.19), a seguinte expressão para fluxo J :

$$J = 2\gamma \sum_k (\bar{n}_{a,k} - \langle a_k^\dagger a_k \rangle), \quad (9.69)$$

com uma expressão análoga para $\langle c_k^\dagger c_k \rangle$. A relação acima, apesar de correta, não é útil para ser usada no nosso caso pois, como podemos observar na expressão (9.36), correções nos números de ocupação $\theta_{ak,ak} = \langle a_k^\dagger a_k \rangle$ são da ordem de g^2 . Assim, para usar a expressão (9.69) seria necessário expandir a matriz de covariância até segunda ordem em g . A fim de contornarmos esse problema, vamos procurar uma fórmula alternativa partindo agora da evolução temporal de $\langle \mathcal{N}_a \rangle$, dada por

$$\frac{d\langle \mathcal{N}_a \rangle}{d\tau} = i \langle [V_{ab}, \mathcal{N}_a] \rangle + \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\mathcal{N}_a) \rangle. \quad (9.70)$$

Assim, vemos que as partículas fluem, a partir do segmento A da cadeia, ou para o reservatório, ou para o segmento B (ou C , caso $L_b = 0$). Comparando o resultado acima com a expressão (9.68) concluímos que, no estado estacionário ($d\langle \mathcal{N}_a \rangle/d\tau = 0$), o fluxo de partículas se torna

$$J = -i \langle [V_{ab}, \mathcal{N}_a] \rangle. \quad (9.71)$$

Usando as definições (8.80) para V_{ab} e (9.66) para $\mathcal{N}_a$, a expressão acima finalmente resulta em

$$J = 2g \sum_{k,q} S_{La,k}^a S_{1,q}^b \text{Im} [\theta_{ak,bq}]. \quad (9.72)$$

No estado estacionário, as fórmulas para os fluxos (9.69) e (9.72) são equivalentes. Entretanto, a vantagem dessa última é que ela pode ser utilizada juntamente com a solução de primeira ordem para a matriz de covariância θ (uma fórmula análoga pode ser definida para o segmento C). No caso particular em que $L_b = 0$, a expressão (9.72) deve ser substituída por

$$J = 2g \sum_{k,q} S_{La,k}^a S_{1,q}^c \text{Im} [\theta_{ak,cq}]. \quad (9.73)$$

Vamos, a seguir, discutir detalhadamente as expressões (9.72) e (9.73). Começamos pela última.

9.4.1 Fluxo para $L_b = 0$

Quando $L_b = 0$, os elementos relevantes da matriz de covariância θ para o cálculo do fluxo de partículas, conforme a expressão (9.73), são dados pelos termos da solução de primeira ordem θ_1 , conforme o resultado (9.42). Os termos provenientes da solução de ordem zero θ_0 , dados pela expressão (9.36), não contribuem, uma vez que seus elementos fora da diagonal

9.4. Fluxo de Partículas

principal são nulos. Lembrando que, em primeira ordem, $\theta = \theta_0 + g\theta_1$, temos portanto

$$\begin{aligned} J &= 2g \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \text{Im} \left[(\theta_0)_{ak,bq} + g(\theta_1)_{ak,bq} \right], \\ &= 2g \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \left\{ \text{Im} \left[\cancel{(\theta_0)_{ak,bq}} \right]^0 + g \text{Im} \left[(\theta_1)_{ak,bq} \right] \right\}, \\ \therefore J &= 2g^2 \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \text{Im} \left[(\theta_1)_{ak,bq} \right]. \end{aligned} \quad (9.74)$$

Substituindo θ_1 , dado na expressão (9.42), no resultado acima, obtemos

$$J = g^2 \gamma \sum_{k,q} \frac{(S_{L_a,k}^a)^2 (S_{1,q}^b)^2 (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,q})}{\gamma^2 + t^2 (\cos k - \cos q)^2}. \quad (9.75)$$

Lembrando que estamos considerando $L_a = L_c \equiv L_r$, usando as definições $\epsilon_{\alpha,k} = -2t \cos k$ e $S_{\ell,k}^\alpha = \sqrt{2/(L_\alpha + 1)} \sin(k\ell)$, e explorando a simetria em relação aos índices k e q , a expressão (9.75) se torna

$$J = \frac{4g^2 \gamma}{(L_r + 1)^2} \sum_{k,q} \frac{\sin^2 k \sin^2 q (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k})}{\gamma^2 + t^2 (\cos k - \cos q)^2}. \quad (9.76)$$

Como vemos, $J = 0$ se $g = 0$ ou $\gamma = 0$. Quando $g = 0$, estamos desacoplando os dois segmentos da cadeia e quando $\gamma = 0$, cada segmento da cadeia é desacoplado dos seus respectivos reservatórios. O fluxo também é nulo quando $\bar{n}_{a,k} = \bar{n}_{c,k}$, ou seja, quando o sistema está em equilíbrio ($T_a = T_c$ e $\mu_a = \mu_c$), conforme o esperado.

O fluxo (9.76) pode ser reescrito de uma forma mais conveniente se definirmos a função

$$\mathcal{I}(k) = \frac{\sin^2 k}{L_r + 1} \sum_q \frac{\sin^2 q}{\gamma^2 + t^2 (\cos k - \cos q)^2}. \quad (9.77)$$

Logo,

$$J = \frac{4g^2 \gamma}{L_r + 1} \sum_k \mathcal{I}(k) (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k}). \quad (9.78)$$

Essa expressão tem a estrutura da fórmula de Landauer para a condução balística de elétrons em junções de tunelamento [56–60]. Para ilustrarmos esse resultado, apresentamos na Figura 9.7 o fluxo de partículas quando $\mu_a = \mu/2$ e $\mu_c = -\mu/2$, de forma que a diferença de potencial químico é μ . Como podemos observar, o fluxo² de partículas apresenta saltos, que se tornam mais evidentes com o aumento do tamanho da cadeia, semelhante ao que é observado em

²De agora em diante, todos os fluxos serão dados em unidades de $g^2 \gamma / t^2$.

Figura 9.7: Fluxo de partículas J como função da diferença de potencial químico μ , calculado através da expressão (9.78) para diferentes tamanhos L_r e $\gamma/t = 1$. As cores representam diferentes temperaturas em unidades de t .

experimentalmente [57]. Esses saltos refletem o caráter discreto dos números de ocupação $\bar{n}_{\alpha,k}$ e tendem a desaparecer com o aumento da temperatura.

Como próximo passo, vamos analisar agora o caso de diferenças infinitesimais entre as temperaturas e entre os potenciais químicos dos reservatórios. Isto é, vamos considerar $\mu_a = \mu + \delta\mu/2$, $\mu_c = \mu - \delta\mu/2$, $T_a = T + \delta T/2$ e $T_c = T - \delta T/2$, onde assumimos que $\delta\mu$ e δT são variações infinitesimais. Nesse caso, devemos expandir os números de ocupação $\bar{n}_{a,k}$ e $\bar{n}_{c,k}$ em série de potências. Para tanto, usamos a expansão da distribuição de Fermi-Dirac

$$\bar{n}(\mu \pm \delta\mu/2, T \pm \delta T/2) \simeq \bar{n}(\mu, T) \pm \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{n}(\mu, T)}{\partial \mu} \delta\mu \pm \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{n}(\mu, T)}{\partial T} \delta T, \quad (9.79)$$

para reescrever o fluxo (9.78) como

$$J = \frac{\partial F}{\partial \mu} \delta\mu + \frac{\partial F}{\partial T} \delta T, \quad (9.80)$$

onde

$$F = \frac{4g^2\gamma}{L_r + 1} \sum_k \mathcal{I}(k) \bar{n}_k. \quad (9.81)$$

9.4. Fluxo de Partículas

Vemos, portanto, que F desempenha o papel de uma energia livre de não-equilíbrio, a partir da qual as diferentes contribuições para o fluxo J podem ser obtidas por diferenciação.

Exemplos das contribuições $\partial F/\partial\mu$ e $\partial F/\partial T$ são mostrados nas figuras 9.8 e 9.9 como função do potencial químico μ , para $\gamma/t = 1$ e $T = 0.02t$. As diferentes imagens correspondem a diferentes tamanhos L_r e a curva tracejada em vermelho corresponde ao limite termodinâmico (equação (9.83) abaixo). As curvas mostram uma forte presença de efeitos de tamanho finito, manifestados através de picos que ocorrem quando $\mu = 2t \cos k$ (lembrando que k assume os valores discretos $\{\pi/L_r+1, \dots, L_r\pi/L_r+1\}$). Conforme o tamanho do sistema aumenta, estas fortes oscilações dão lugar a uma curva suave, que fornece um fluxo não-nulo no intervalo $\mu \in [-2t, 2t]$, correspondente a largura de banda das energias ϵ_k . É interessante mencionar que esses efeitos de tamanho finito são característicos de baixas temperaturas. Para $T/t \sim 1$, as curvas se tornam suaves.

Limite Termodinâmico

Vamos considerar agora o limite termodinâmico do sistema fazendo a conversão usual das somas em integrais na primeira zona de Brillouin. Nesse caso, a expressão (9.77) se torna

$$I(k) = \frac{\sin^2 k}{\pi} \int_0^\pi \frac{\sin^2 q}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2} dq. \quad (9.82)$$

Analogamente, as expressões (9.78) e (9.81) são convertidas em

$$J = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi I(k)(\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k})dk, \quad (9.83)$$

e

$$F = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi I(k)\bar{n}_k dk. \quad (9.84)$$

Essas expressões foram utilizadas para plotar a curva vermelha nas figuras 9.8 e 9.9.

A integral (9.82) recai na categoria da integral (9.59). Logo, os comportamentos correspondentes para os regimes $\gamma/t \ll 1$ e $\gamma/t \gg 1$ são obtidos diretamente das expressões (9.60) e (9.61):

$$I(k) \simeq \begin{cases} \frac{|\sin k|^3}{\gamma t}, & \gamma \ll t, \\ \frac{\sin^2 k}{2\gamma^2}, & \gamma \gg t. \end{cases} \quad (9.85)$$

Vale apenas mencionar, por completeza, que a integral (9.82) pode ser obtida analiticamente e é

Figura 9.8: Fluxo de partículas devido a um gradiente de potencial químico como função do potencial químico, $\partial F/\partial\mu$ vs μ , plotado usando a expressão (9.81), com $\gamma/t = 1$ e $T = 0.02t$. Cada imagem corresponde a um tamanho distinto de L_r , respectivamente: (a) 1, (b) 4, (c) 10, (d) 20, (e) 50, (f) 80, (g) 120 e (h) 160. A linha tracejada vermelha corresponde ao limite termodinâmico, conforme a expressão (9.84).

dada por

$$I(k) = \frac{\sin^2 k}{t^2} \left\{ \frac{[\lambda_1 + (\lambda_1^2 + \lambda_2^2)^{1/2}]^{1/2}}{\gamma\sqrt{2}} - 1 \right\}, \quad (9.86)$$

onde $\lambda_1 = \gamma^2 + t^2 \sin^2 k$ e $\lambda_2 = 2\gamma t \cos k$. A dependência do fluxo com o acoplamento γ é investigada na Figura 9.10. Vamos agora discutir como obter formas analíticas para essas funções no caso em que $T \rightarrow 0$.

À temperatura zero, usamos novamente o fato de que $\bar{n}_k = \Theta(\mu - \epsilon_k) = \Theta(k_F - k)$. Lembrando também que o momento de Fermi é definido como $k_F(\mu) = \arccos(-\mu/2t) =$

9.4. Fluxo de Partículas

Figura 9.9: Fluxo de partículas devido a um gradiente de temperatura como função do potencial químico, $\partial F/\partial T$ vs μ , plotado usando a expressão (9.81), com $\gamma/t = 1$ e $T = 0.02t$. Cada imagem corresponde a um tamanho distinto de L_r , respectivamente: (a) 1, (b) 4, (c) 10, (d) 20, (e) 50, (f) 80, (g) 120 e (h) 160. A linha tracejada vermelha corresponde ao limite termodinâmico, conforme a expressão (9.84).

$\pi - \arccos(\mu/2t)$, vemos que a expressão (9.84) se torna

$$F = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi \mathcal{I}(k) \Theta(k_F - k) dk = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^{k_F} \mathcal{I}(k) dk. \quad (9.87)$$

Assim, temos

$$\frac{\partial F}{\partial \mu} = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \mathcal{I}[k_F(\mu)] \frac{dk_F}{d\mu} = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \frac{\mathcal{I}[k_F(\mu)]}{2t \sin k_F(\mu)}, \quad (9.88)$$

sendo $\sin k_F(\mu) = \sqrt{1 - \mu^2/4t^2}$. Nos regimes $\gamma \ll t$ e $\gamma \gg t$, usamos os resultados aproxima-

Figura 9.10: Influência do acoplamento γ no fluxo de partículas à temperatura zero, no limite termodinâmico. (a) $\partial F / \partial \mu$ vs μ e (b) $\partial F / \partial T$ vs μ . As curvas foram feitas usando as expressões (9.88) e (9.91).

dos (9.85) para obter as formas explícitas, válidas para $\mu \in [-2t, 2t]$:

$$\frac{\partial F}{\partial \mu} \simeq \begin{cases} \frac{g^2}{2\pi t^4} (4t^2 - \mu^2), & \gamma \ll t, \\ \frac{g^2}{2\pi t^2 \gamma} \sqrt{4t^2 - \mu^2}, & \gamma \gg t, \end{cases} \quad (9.89)$$

que coincidem exatamente com as curvas vermelha ($\gamma/t \ll 1$) e roxa ($\gamma/t \gg 1$) na Figura 9.10a.

Analogamente, vamos analisar também o comportamento de $\partial F / \partial T$ quando $T \rightarrow 0$. Nesse caso, não pode haver variação na temperatura, de forma que devemos procurar pela menor contribuição em T . Para tanto, realizamos uma expansão de Sommerfeld [54], reescrevendo a integral em (9.84) como

$$\begin{aligned} \int_0^\pi I(k) \bar{n}_k dk &= \int_{-2t}^{2t} \frac{I[k(\epsilon)]}{d\epsilon/dk} \frac{d\epsilon}{e^{(\epsilon-\mu)/T} + 1}, \\ &\simeq O(T^0) + \frac{\pi^2}{6} T^2 \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left[\frac{I[k(\epsilon)]}{d\epsilon/dk} \right]_{\epsilon=\mu}, \end{aligned} \quad (9.90)$$

onde o primeiro termo é independente da temperatura. Consequentemente, obtemos que $\partial F / \partial T$ pode ser escrito como

$$\frac{\partial F}{\partial T} \simeq \frac{4\pi T g^2 \gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \mu} \left[\frac{I[k_F(\mu)]}{2t \sin k_F(\mu)} \right]. \quad (9.91)$$

Usando novamente os resultados em (9.85), obtemos o comportamento da expressão acima

9.4. Fluxo de Partículas

para os regimes $\gamma/t \ll 1$ e $\gamma/t \gg 1$:

$$\frac{\partial F}{\partial T} \simeq \begin{cases} -\frac{\pi g^2 T \mu}{3t^4}, & \gamma \ll t, \\ -\frac{\pi g^2 T \mu}{6t^2 \gamma \sqrt{4t^2 - \mu^2}}, & \gamma \gg t, \end{cases} \quad (9.92)$$

válidas, novamente, para o intervalo $\mu \in [-2t, 2t]$. Essas duas fórmulas correspondem precisamente às curvas vermelha ($\gamma/t \ll 1$) e roxa ($\gamma/t \gg 1$) na [Figura 9.10b](#). Isso mostra que, para $\gamma/t \ll 1$, o fluxo apresente um comportamento linear em μ . Entretanto, para $\gamma/t \gg 1$, o fluxo apresenta picos agudos próximos às extremidades do intervalo. Com isso, encerramos a discussão para o fluxo de partículas no caso em que $L_b = 0$.

9.4.2 Fluxo para $L_b \neq 0$

Vamos analisar agora o fluxo de partículas quando o comprimento do segmento B da cadeia é não-nulo. A definição de J nesse caso é dada através da expressão (9.72), com os elementos da matriz de covariância dados pela expressão (9.45a). Dessa forma, o fluxo se torna

$$J = \frac{8g^2\gamma}{(L_r + 1)(L_b + 1)} \sum_{k,q} \frac{\sin^2 k \sin^2 q (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{b,q})}{\gamma^2 + 4t^2(\cos k - \cos q)^2}. \quad (9.93)$$

Note que agora os valores permitidos para k e q são distintos, já que L_r e L_b são arbitrários. Portanto, não podemos usar os argumentos de simetria dos índices como fizemos no caso $L_b = 0$. Note também que o fluxo agora depende de $\bar{n}_{b,q}$, dado na expressão (9.55).

Um caso particular interessante da expressão (9.93), é quando $L_r = 1$. Nesse caso, $\bar{n}_{b,q} = (\bar{n}_a + \bar{n}_c)/2$, conforme o resultado (9.56), e o fluxo se torna

$$J = \frac{2g^2\gamma}{L_b + 1} (\bar{n}_a - \bar{n}_c) \sum_q \frac{\sin^2 q}{\gamma^2 + 4t^2 \cos^2 q} \quad (9.94)$$

que corresponde simplesmente a um coeficiente constante multiplicado pela diferença dos números de ocupação ($\bar{n}_a - \bar{n}_c$). Se tomarmos o limite termodinâmico para L_b , fazendo a conversão da soma em um integral, a expressão acima resulta em

$$J = \frac{2g^2\gamma}{\pi} (\bar{n}_a - \bar{n}_c) \int_0^\pi \frac{\sin^2 q}{\gamma^2 + 4t^2 \cos^2 q} = \frac{g^2\gamma}{t^2} \frac{\bar{n}_a - \bar{n}_c}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4t^2}{\gamma^2}} - 1 \right). \quad (9.95)$$

Uma cadeia do tipo XX homogênea ($g = t$) interagindo com reservatórios de um único *spin* foi estudada na referência [76], onde o fluxo de partículas foi obtido exatamente e é dado pela

fórmula

$$J = \frac{\gamma}{t^2 + \gamma^2} \frac{\bar{n}_a - \bar{n}_c}{2}. \quad (9.96)$$

A diferença entre esse resultado e a expressão expressões (9.95) reside no fato de termos considerado uma cadeia não homogênea ($g \neq t$). Se considerarmos $g = t$ e continuarmos a expansão em série da matriz de covariância θ até ordens superiores em g , nós recuperaríamos o resultado (9.96), como pode ser facilmente verificado através das simulações numéricas. No regime em que $\gamma/t \gg 1$, entretanto, as duas expressões apresentam comportamentos semelhantes, escalando com $J \sim 1/\gamma$.

Exemplos da expressão (9.93) podem ser vistos na Figura 9.11 para $\gamma/t = 1$ e $\gamma/t = 10$, com diferentes escolhas de L_r e L_b . Quando $\gamma/t \gg 1$, os números de ocupação $\bar{n}_{b,q}$ se

Figura 9.11: Fluxo de partículas J vs μ para diferentes valores de L_b (ver legenda abaixo das imagens), calculado através da expressão (9.93) com $T = 0.02t$ para diferentes combinações de L_r e γ/t : (a) $L_r = 50, \gamma/t = 10$; (b) $L_r = 100, \gamma/t = 10$; (c) $L_r = 50, \gamma/t = 1$ e (d) $L_r = 100, \gamma/t = 1$. A curva tracejada em preto corresponde à expressão (9.88).

tornam independentes de q , conforme vimos na expressão (9.62b). Dessa forma, o fluxo J na expressão (9.93) se torna independente do tamanho L_b do segmento B da cadeia. Isso pode ser visto nas figuras 9.11a e 9.11b, que correspondem a $\gamma/t = 10$, onde as curvas para

9.4. Fluxo de Partículas

diferentes valores de L_b praticamente coincidem. Além disso, essas curvas tendem ao mesmo comportamento do fluxo quando $L_b = 0$, representado pela curva tracejada em preto, obtida a partir da relação (9.88). Assim, podemos concluir que no regime $\gamma/t \gg 1$, a presença do segmento B na cadeia não afeta de nenhuma maneira o fluxo de partículas através do sistema. Por outro lado, quando $\gamma/t \ll 1$ (figuras 9.11c e 9.11d), uma dependência com L_b se torna visível. Entretanto, apesar da diferença entre os casos $L_b = 1$ e $L_b = 2$ ser substancial, as curvas para $L_b = 4$ e $L_b = 10$ praticamente coincidem. Notamos ainda que nenhuma das curvas, nesse caso, coincide com o caso em que $L_b = 0$, mostrando então que no regime $\gamma/t \sim 1$, a presença do segmento B afeta as propriedades do fluxo de partículas no sistema.

Já o comportamento do fluxo (9.93) no regime $\gamma/t \ll 1$ é muito mais intrigante uma vez que, nesse caso, o fluxo depende sensivelmente dos tamanhos L_r e L_b . O motivo para isso é o fluxo terá uma contribuição substancial sempre que $(\cos k - \cos q) \sim 0$. E dado que k e q assumem valores discretos, o comportamento de J mudará substancialmente para diferentes combinações de L_r e L_b .

Como uma forma de melhor analisar o comportamento do fluxo no regime $\gamma/t \ll 1$ vamos supor, por simplicidade, que os segmentos A e C tendem para o limite termodinâmico, enquanto o tamanho do segmento B permanece arbitrário. Nesse caso, convertendo a soma em integral na expressão (9.93), obtemos

$$J = \frac{8g^2\gamma}{\pi(L_b + 1)} \sum_q \int_0^\pi \frac{\sin^2 k \sin^2 q (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{b,q})}{\gamma^2 + 4t^2(\cos k - \cos q)^2} dk. \quad (9.97)$$

Agora, usando os resultados (9.61) e (9.62a) para aproximarmos o fluxo (9.97) para $\gamma/t \ll 1$, temos que

$$J \simeq \frac{2g^2\gamma}{L_b + 1} \sum_q |\sin^3 q| (\bar{n}_{a,q} - \bar{n}_{c,q}). \quad (9.98)$$

Comparando esse resultado com as expressões (9.78) e (9.85), concluímos que, no regime $\gamma/t \ll 1$, o fluxo no segmento B da cadeia se comporta de maneira semelhante ao fluxo para $L_b = 0$ visto na Subseção 9.4.2. Essa ideia está ilustrada na Figura 9.12, que mostra o fluxo (9.97) para $L_b = 10$ e alguns valores de γ/t . Como podemos ver, quando γ/t diminui, o fluxo se aproxima do comportamento da Figura 9.8c, a qual foi feita com $L_b = 0$ e $L_r = 10$.

Figura 9.12: $J/\delta\mu$ vs μ para diferentes valores de γ/t , com $L_b = 10$ e $T = 0.02t$. No regime $\gamma/t \ll 1$, a curva se assemelha à [Figura 9.8c](#).

9.5 Fluxo de Calor & Coeficientes de Onsager

Vamos agora discutir os fluxos de energia e calor (que são distintos, conforme veremos mais adiante) e também vamos obter os coeficientes de Onsager para este problema. Para encontrarmos uma fórmula para o fluxo de energia, vamos repetir o mesmo procedimento que realizamos para obter o fluxo de partículas (9.71) mas, no lugar do operador $\mathcal{N}$ para o número total de partículas, usaremos o hamiltoniano do sistema $\mathcal{H}_{XX}$. Partindo da equação mestra (8.81) (ou diretamente da equação (9.4) para o valor médio de um operador), obtemos a equação para a evolução de $\langle \mathcal{H}_{XX} \rangle$:

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathcal{H}_{XX} \rangle = \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\mathcal{H}_{XX}) \rangle + \langle \tilde{\mathcal{D}}_c(\mathcal{H}_{XX}) \rangle, \quad (9.99)$$

sendo $\tilde{\mathcal{D}}_\alpha$ o dissipador adjunto definido na expressão (9.5). No estado estacionário, $d\langle \mathcal{H}_{XX} \rangle/d\tau = 0$. Assim, o fluxo de energia é dado por

$$J_E \equiv \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\mathcal{H}_{XX}) \rangle = -\langle \tilde{\mathcal{D}}_c(\mathcal{H}_{XX}) \rangle. \quad (9.100)$$

Lembrando que $\mathcal{H}_{XX} = \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_b + \mathcal{H}_c + V_{ab} + V_{bc}$ e que os dissipadores só atuam em seus respectivos segmentos, temos

$$J_E = \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\mathcal{H}_{XX}) \rangle = \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\mathcal{H}_a) \rangle + \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(V_{ab}) \rangle, \quad (9.101)$$

9.5. Fluxo de Calor & Coeficientes de Onsager

onde

$$\langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\mathcal{H}_a) \rangle = 2\gamma \sum_k \epsilon_k (\bar{n}_{a,k} - \langle a_k^\dagger a_k \rangle), \quad (9.102a)$$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(V_{ab}) \rangle &= g\gamma \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b [\langle a_k^\dagger b_q + b_q^\dagger a_k \rangle], \\ &= 2g\gamma \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \text{Re}[\theta_{ak,bq}]. \end{aligned} \quad (9.102b)$$

A equação (9.102a), assim como no caso do fluxo de partículas, requer uma expansão da matriz de covariância até segunda ordem em g na expressão (9.25), uma vez que as correções para $(\theta_0)_{ak,ak} = \langle a_k^\dagger a_k \rangle$ são da ordem de g^2 , conforme verificamos na expressão (9.35). A fim de obter uma solução de primeira ordem, vamos olhar para a equação de evolução temporal de $\langle \mathcal{H}_a \rangle$, novamente através da equação mestra (8.81) ou, equivalentemente, da equação (9.4) para o valor médio de um operador:

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathcal{H}_a \rangle = i \langle [V_{ab}, \mathcal{H}_a] \rangle + \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\mathcal{H}_a) \rangle. \quad (9.103)$$

Logo, no estado estacionário temos que

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathcal{D}}_a(\mathcal{H}_a) \rangle &= -i \langle [V_{ab}, \mathcal{H}_a] \rangle, \\ &= -ig \sum_{k,q} \epsilon_{a,k} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \langle a_k^\dagger b_q - b_q^\dagger a_k \rangle, \\ &= 2g \sum_{k,q} \epsilon_{a,k} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \text{Im}[\theta_{ak,bq}]. \end{aligned} \quad (9.104)$$

Combinando os resultados (9.102) e (9.104) obtemos, portanto

$$J_E = 2g \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \left\{ \gamma \text{Re}[\theta_{ak,bq}] + \epsilon_{a,k} \text{Im}[\theta_{ak,bq}] \right\}. \quad (9.105)$$

No caso $L_b = 0$, a expressão acima deve ser substituída por

$$J_E = 2g \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^c \left\{ \gamma \text{Re}[\theta_{ak,cq}] + \epsilon_{a,k} \text{Im}[\theta_{ak,cq}] \right\}. \quad (9.106)$$

9.5.1 Fluxo de Energia para $L_b = 0$

A análise do fluxo de energia é essencialmente a mesma que fizemos para o fluxo de partículas. Por esse motivo, faremos uma discussão mais breve, uma vez que todos os cálculos exigidos são completamente análogos ao caso anterior. Por simplicidade vamos, também, restringir a discussão do fluxo de energia apenas para o caso $L_b = 0$ (já que o caso $L_b \neq 0$ é análogo ao que fizemos para o fluxo de partículas na [Subseção 9.4.2](#)). Substituindo as definições de $\theta_{ak,bq}$ [expressão (9.42)] e de $\epsilon_{a,k} = -2t \cos k$ na expressão (9.106), obtemos:

$$J_E = \frac{4g^2\gamma}{(L_r + 1)^2} \sum_{k,q} \frac{\sin^2 k \sin^2 q (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k})(\epsilon_k + \epsilon_q)/2}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2}, \quad (9.107)$$

onde usamos argumentos de simetria para fazer $\bar{n}_{c,q} \rightarrow \bar{n}_{c,k}$ assim como fizemos no fluxo de partículas (9.76). É conveniente definirmos a função

$$\mathcal{I}_E(k) = \frac{\sin^2 k}{2(L_r + 1)} \sum_q \frac{\sin^2 q (\epsilon_k + \epsilon_q)}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2}, \quad (9.108)$$

de forma que o fluxo (9.107) se torna

$$J_E = \frac{4g^2\gamma}{L_r + 1} \sum_k \mathcal{I}_E(k) (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k}). \quad (9.109)$$

No caso de variações infinitesimais de temperatura e potencial químico, semelhante ao que fizemos para o fluxo de partículas, o fluxo de energia fica

$$J_E = \frac{\partial G}{\partial \mu} \delta \mu + \frac{\partial G}{\partial T} \delta T, \quad (9.110)$$

sendo

$$G = \frac{4g^2\gamma}{L_r + 1} \sum_k \mathcal{I}_E(k) \bar{n}_k. \quad (9.111)$$

Exemplos dos termos $\partial G/\partial \mu$ e $\partial G/\partial T$ são mostrados nas figuras 9.13 e 9.14 para condições similares àsquelas usadas nas figuras 9.8 e 9.9. Como podemos observar, os efeitos de tamanho finito são similares àqueles presentes no fluxo de partículas.

Agora, a fim de considerarmos o limite termodinâmico, devemos converter a soma na função $\mathcal{I}_E(k)$ presente na expressão (9.108) para uma integral e, então, usar os resultados (9.60)

9.5. Fluxo de Calor & Coeficientes de Onsager

Figura 9.13: Fluxo de energia devido a um gradiente de potencial químico como função do potencial químico, $\partial G/\partial\mu$ vs μ , plotado usando a expressão (9.111), com $\gamma/t = 1$ e $T = 0.02t$. Cada imagem corresponde a um tamanho distinto de L_r , respectivamente: (a) 2, (b) 4, (c) 10, (d) 20, (e) 50, (f) 80, (g) 120 e (h) 160. A linha tracejada vermelha corresponde ao limite termodinâmico.

e (9.61) para explorar os regimes $\gamma/t \ll 1$ e $\gamma/t \gg 1$. Assim, obtemos

$$\mathcal{I}_E(k) \simeq \begin{cases} \frac{\epsilon_k |\sin k|^3}{\gamma t} = \epsilon_k \mathcal{I}(k), & \gamma \ll t, \\ \frac{\epsilon_k \sin^2 k}{4\gamma^2} = \frac{\epsilon_k \mathcal{I}(k)}{2}, & \gamma \gg t, \end{cases} \quad (9.112)$$

sendo $\mathcal{I}(k)$ a função (9.85). O fator $1/2$ na segunda expressão tem, como veremos mais à frente, consequências importantes no comportamento do sistema. Para valores intermediários de γ/t , a integral pode ser calculada analiticamente. Entretanto, o resultado é bastante complicado e

Figura 9.14: Fluxo de energia devido a um gradiente de temperatura como função do potencial químico, $\partial G/\partial T$ vs μ , plotado usando a expressão (9.111), com $\gamma/t = 1$ e $T = 0.02t$. Cada imagem corresponde a um tamanho distinto de L_r , respectivamente: (a) 2, (b) 4, (c) 10, (d) 20, (e) 50, (f) 80, (g) 120 e (h) 160. A linha tracejada vermelha corresponde ao limite termodinâmico.

não mostraremos aqui.

Usando os resultados (9.112), escrevemos o fluxo de energia (9.109) como

$$J_E \simeq \begin{cases} \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi I(k) \epsilon_k (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k}) dk, & \gamma \ll t, \\ \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi \frac{I(k)}{2} \epsilon_k (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k}) dk, & \gamma \gg t, \end{cases} \quad (9.113)$$

que é análogo, a menos to termo de energia ϵ_k , à expressão (9.83) para o fluxo de partículas.

9.5. Fluxo de Calor & Coeficientes de Onsager

Da mesma maneira, a expressão (9.111) para a função G se torna

$$G \simeq \begin{cases} \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi I(k) \epsilon_k \bar{n}_k dk, & \gamma \ll t, \\ \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi \frac{I(k)}{2} \epsilon_k \bar{n}_k dk, & \gamma \gg t, \end{cases} \quad (9.114)$$

que é por sua vez análoga à função F definida em (9.84).

Para finalizarmos nossa análise do fluxo de energia, vamos considerar o sistema à temperatura zero. Para tanto, notamos que os resultados (9.88) para $\partial F/\partial\mu$ à temperatura zero e (9.91) para $\partial F/\partial T$ à temperatura zero, continuam válidos para o fluxo de energia, bastando que façamos a substituição $I(k) \rightarrow I_E(k)$. Assim,

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial \mu} &\simeq \frac{4g^2\gamma}{\pi} \frac{I_E[k_F(\mu)]}{2t \sin k_F(\mu)}, \\ \frac{\partial G}{\partial T} &\simeq \frac{4\pi T g^2\gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \mu} \left[\frac{I_E[k_F(\mu)]}{2t \sin k_F(\mu)} \right]. \end{aligned} \quad (9.115)$$

Substituindo, então, o resultado (9.112) nas expressões acima, obtemos

$$\frac{\partial G}{\partial \mu} = \begin{cases} \frac{g^2\mu(4t^2-\mu^2)}{2\pi t^4}, & \gamma \ll t, \\ \frac{g^2\mu\sqrt{4t^2-\mu^2}}{4\pi t^4\gamma}, & \gamma \gg t, \end{cases} \quad (9.116)$$

e

$$\frac{\partial G}{\partial T} = \begin{cases} \frac{\pi^2 g^2 T \mu (4t^2 - 3\mu^2)}{6t^4}, & \gamma \ll t, \\ \frac{\pi g^2 T}{6\gamma t^2} \frac{2t^2 - \mu^2}{\sqrt{4t^2 - \mu^2}}, & \gamma \gg t. \end{cases} \quad (9.117)$$

Esses dois últimos resultados são mostrados na **Figura 9.15**. As curvas vermelha e roxa na **Figura 9.15a** correspondem exatamente às expressões dadas em (9.116). Na **Figura 9.15b**, essas curvas correspondem à expressão (9.117). Finalizada a análise do fluxo de energia, vamos agora discutir sua relação com o fluxo de partículas.

Figura 9.15: Influência do acoplamento γ no fluxo de energia à temperatura zero, no limite termodinâmico. (a) $\partial G/\partial \mu$ vs μ e (b) $\partial G/\partial T$ vs μ . As curvas foram feitas usando as expressões em (9.115).

9.5.2 Coeficientes de Onsager

A partir da primeira Lei da Termodinâmica, temos que o fluxo de energia deve apresentar duas contribuições distintas: uma proveniente do fluxo de calor e outra devido ao fluxo de partículas. Ou seja, devemos ter que $J_E = J_Q + \mu J$, onde J_Q é o fluxo de calor através do sistema. Uma vez que já sabemos J e J_E , podemos facilmente obter o fluxo de calor:

$$J_Q = J_E - \mu J. \quad (9.118)$$

Assim, os fluxos de calor e de partículas podem ser escritos em termos dos *coeficientes de Onsager* [13] definindo-se as variações infinitesimais $\delta\mu/T$ e $-\delta(1/T)$. Dessa forma, os fluxos J e J_Q devem satisfazer

$$\begin{pmatrix} J \\ J_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_{11} & \ell_{12} \\ \ell_{21} & \ell_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mu/T \\ -\delta(1/T) \end{pmatrix}, \quad (9.119)$$

onde os elementos de matriz ℓ_{ij} são os coeficientes de Onsager e constituem a chamada matriz de Onsager. De acordo com as relações de reciprocidade de Onsager [13], devemos esperar que $\ell_{12} = \ell_{21}$. Além disso, a taxa de produção de entropia no estado estacionário é definida como

$$\Pi = J \frac{\delta\mu}{T} - J_Q \delta \left(\frac{1}{T} \right), \quad (9.120)$$

e deve ser sempre uma quantidade não negativa. Essa propriedade é satisfeita para quaisquer variações infinitesimais dado que o determinante da matriz de Onsager, $\ell_{11}\ell_{22} - \ell_{12}\ell_{21}$, é não-negativo.

9.5. Fluxo de Calor & Coeficientes de Onsager

Agora, usamos todos os resultados anteriores para obter os coeficientes de Onsager. Da matriz de Onsager (9.119), temos que

$$J = \ell_{11} \frac{\delta\mu}{T} + \ell_{12} \frac{\delta T}{T^2}, \quad (9.121a)$$

$$J_Q = \ell_{21} \frac{\delta\mu}{T} + \ell_{22} \frac{\delta T}{T^2}. \quad (9.121b)$$

Comparando, então, o fluxo (9.121a) com a expressão (9.80), obtemos

$$\ell_{11} = T \frac{\partial F}{\partial \mu}, \quad \ell_{12} = T^2 \frac{\partial F}{\partial T}. \quad (9.122)$$

De forma análoga, usando as definições (9.80) e (9.110) para obter J_Q e comparando com a expressão (9.121b), obtemos os demais coeficientes

$$\ell_{21} = T \left[\frac{\partial G}{\partial \mu} - \mu \frac{\partial F}{\partial \mu} \right], \quad \ell_{22} = T^2 \left[\frac{\partial G}{\partial T} - \mu \frac{\partial F}{\partial T} \right]. \quad (9.123)$$

Exemplos dos coeficientes de Onsager, calculados no limite termodinâmico, são mostrados na **Figura 9.16** para diferentes valores de γ/t . Como é possível observar, os coeficientes diretos ℓ_{11} e ℓ_{22} são sempre positivos, como esperado. observamos também, que o determinante da matriz de Onsager é sempre positivo, uma vez que os coeficientes cruzados ℓ_{12} e ℓ_{21} possuem sempre o mesmo sinal, garantindo uma produção de entropia positiva. Apesar de possuírem o mesmo sinal, os valores dos coeficientes cruzados só coincidem entre si para $\gamma/t \ll 1$. Esse fato está ilustrado especificamente na **Figura 9.17**, onde comparamos ℓ_{12} e ℓ_{21} para $\gamma/t = 0.0001$ [imagem (a)] e $\gamma/t = 0.001$ [imagem (b)]. Como podemos verificar, essas duas grandezas coincidem apenas para o menor valor de γ/t . Esse comportamento pode ser demonstrado analiticamente. Para tanto, usamos a expressão (9.84) para obtermos o coeficiente ℓ_{12} na expressão (9.122), que nos dá

$$\ell_{12} = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi \mathcal{I}(k) T^2 \frac{\partial \bar{n}}{\partial T} dk, \quad (9.124)$$

que vale para qualquer valor de γ . Entretanto, para calcularmos o coeficiente ℓ_{21} na expressão (9.123) devemos distinguir entre os regimes de γ/t . A partir da expressão (9.114), se $\gamma/t \ll 1$, temos então que

$$\ell_{21} = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi \mathcal{I}(k) T (\epsilon_k - \mu) \frac{\partial \bar{n}}{\partial \mu}. \quad (9.125)$$

Figura 9.16: Coeficientes de Onsager obtidos a partir das expressões (9.122) e (9.122), no limite termodinâmico, com $T = 0.02t$ e diferentes valores de γ/t , conforme mostrado em (c).

Lembrando que $\bar{n}_k$ corresponde à distribuição de Fermi-Dirac [conforme a expressão (8.83)], temos a igualdade

$$\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial T} = \frac{\epsilon_k - \mu}{T} \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial \mu}, \quad (9.126)$$

que substituída na expressão (9.122) para ℓ_{12} resulta exatamente na expressão (9.123) para ℓ_{21} . Assim, concluímos que para $\gamma/t \ll 1$, $\ell_{12} = \ell_{21}$. Porém, no caso em que $\gamma/t \gg 1$, a igualdade entre esses coeficientes deixa de ser válida devido à presença do fator $1/2$ na segunda linha da expressão (9.114). Isso explica os resultados na Figura 9.17.

A relação de reciprocidade $\ell_{12} = \ell_{21}$ é uma consequência direta do balanceamento detalhado no sistema [13]. Portanto, os resultados apresentados aqui indicam que, na nossa configuração de múltiplos sítios, o sistema deve satisfazer o balanceamento detalhado apenas no regime $\gamma/t \ll 1$. Esse indício é corroborado pelos resultados apresentados na Figura 9.6.

9.6. Discussão e Conclusões

Figura 9.17: Comparação entre os coeficientes de Onsager cruzados, ℓ_{12} e ℓ_{21} , para (a) $\gamma/t = 0.0001$ e (b) $\gamma/t = 0.001$. A temperatura é tal que $T = 0.02t$.

9.6 Discussão e Conclusões

Em geral, as propriedades de não equilíbrio de cadeias quânticas abertas são extremamente sensíveis ao tipo de dissipador utilizado para modelar o reservatório ao qual o sistema está em contato. Além disso, a menos que haja um conhecimento experimental detalhado a respeito do acoplamento sistema-reservatório, a estrutura do dissipador não é única. Daí a importância de se compreender as propriedades de estados estacionários fora do equilíbrio sob a influência de diferentes tipos de dissipadores. Sob tal perspectiva, discutimos em detalhes neste trabalho as propriedades de reservatórios atuando em múltiplos sítios, em que os dissipadores de Lindblad atuam em grupos de *spins* de tal forma que, se isolados do restante do sistema, termalizam corretamente para o estado de Gibbs. Para o sistema considerado aqui, que é quadrático em termos de operadores fermiônicos, esse tipo de dissipador é facilmente construído através do acoplamento aos modos normais do hamiltoniano. De fato, vale a pena mencionar que essa abordagem pode ser utilizada para qualquer hamiltoniano quadrático, fermiônico ou bosônico. Consequentemente, juntamente com os resultados perturbativos apresentados aqui, essa estrutura de reservatórios de múltiplos sítios abre caminho para a pesquisa em muitos outros sistemas da mecânica estatística e matéria condensada em geral.

Nós mostramos que os reservatórios de múltiplos sítios introduzem propriedades físicas que são muito mais ricas comparadas àquelas dos reservatórios que atuam em um único sítio. Usando um método perturbativo, mostramos ainda que os fluxos de partículas e de energia têm a estrutura da fórmula de Landauer. Além disso, obtivemos também fórmulas para os coeficientes de Onsager. Em todos os resultados, observamos uma dependência sensível do acoplamento com o reservatório γ . No regime em que $\gamma/t \ll 1$, que é a situação esperada experimentalmente, o sistema obedece as relações de reciprocidade de Onsager e a ocupação no segmento central

Capítulo 9. Resultados e Análises

da cadeia termaliza corretamente para sua distribuição de Fermi-Dirac. Por outro lado, no regime $\gamma/t \gg 1$, verificamos que todos os modos tendem a contribuir igualmente, levando a modificações expressivas nas propriedades do sistema.

Capítulo 10

Considerações Finais & Perspectivas

Nesta tese estudamos, de maneira geral, fenômenos de transporte em sistemas fora do equilíbrio em dois contextos distintos: clássico e quântico. No contexto clássico, analisamos a lei de Fourier e a retificação térmica, ambos associados ao fenômeno de condução de calor, a partir de um modelo microscópico sujeito a um ruído estocástico conservativo. O modelo é dado por uma cadeia de partículas que interagem entre si harmonicamente e ao mesmo tempo estão sujeitas a um potencial local (*pinning*) anarmônico quártico. As partículas das extremidades estão sujeitas ainda à interação com reservatórios térmicos mantidos a temperaturas distintas. A partir dos resultados obtidos através de extensas simulações numéricas, concluímos que a presença do ruído conservativo garante, além da validade da lei de Fourier, que o sistema apresente um coeficiente de retificação não-nulo quando o limite termodinâmico é considerado. Uma variação do modelo originalmente proposto foi utilizada, e as mesmas conclusões foram verificadas, o que nos levou a conjecturar um possível caráter universal para o comportamento de sistemas clássicos na presença do ruído conservativo.

No contexto quântico, estudamos os fluxos estacionários de energia e de partículas em uma cadeia quântica de *spins* do tipo XX . Para tanto, introduzimos um novo tipo de dissipador para modelar o contato do sistema com os reservatórios. Tal dissipador atua em um grupo de sítios da cadeia de forma que, se isolados do restante do sistema, termalizam corretamente para o estado de equilíbrio de Gibbs. Dada a natureza quadrática do sistema considerado (que pode ser escrito em termos de operadores fermiônicos através da transformação de Jordan-Wigner), o dissipador pode ser prontamente construído através do acoplamento aos modos normais do hamiltoniano. A partir da equação mestra de Lindblad, obtivemos uma equação matricial exata de Lyapunov para as covariâncias entre os operadores fermiônicos do sistema. Essa equação foi resolvida através de um método perturbativo, que nos permitiu encontrar expressões analíticas para os fluxos de energia e de partículas, que possuem a estrutura da fórmula de Landauer. Além disso,

determinamos os coeficientes de Onsager entre estes fluxos. Verificamos ainda que o sistema é extremamente sensível ao acoplamento γ com os reservatórios, de forma que sua termalização correta para o estado de equilíbrio de Gibbs e a verificação do balanceamento detalhado só são satisfeitas no regime $\gamma/t \ll 1$. Todos os resultados analíticos foram corroborados por extensas soluções numéricas da equação de Lyapunov.

Perspectivas Futuras

No que diz respeito a sistemas quânticos, conforme discutimos no [Capítulo 6](#), não existe um formalismo definitivo que nos permita descrever sistemas fora do equilíbrio de maneira precisa. Diversos métodos têm sido recentemente propostos nessa direção (incluindo o método apresentado nesta tese). Um deles, proposto recentemente por Mário José de Oliveira [9], consiste na quantização canônica da equação de Fokker-Planck-Kramers (FPK) (3.20) que descreve (corretamente) sistemas clássicos fora do equilíbrio. A versão quantizada da equação FPK para um sistema de N partículas interagentes, cada uma em contato com um reservatório mantido a uma temperatura distinta, é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\mathcal{H}, \rho] - \sum_{\ell=1}^N [x_{\ell}, J_{\ell}(\rho)], \quad (10.1)$$

sendo $\mathcal{H} = \sum_{\ell} p_{\ell}^2/2m_{\ell} + V(x)$ o hamiltoniano do sistema e

$$J_{\ell}(\rho) = -\frac{\gamma_{\ell}}{2} (\rho g_{\ell} + g_{\ell}^{\dagger} \rho) - \frac{\gamma_{\ell} m_{\ell}}{i\hbar \beta_{\ell}} [x_{\ell}, \rho], \quad (10.2)$$

com

$$g_i = -\frac{m_{\ell}}{i\hbar \beta_{\ell}} (e^{\beta_{\ell} \mathcal{H}} x e^{-\beta_{\ell} \mathcal{H}} - x_{\ell}), \quad \beta_{\ell} = \frac{1}{k_B T_{\ell}}. \quad (10.3)$$

Aqui, γ_{ℓ} representa o acoplamento da ℓ -ésima partícula ao seu respectivo reservatório. Portanto, o segundo termo no lado direito da equação mestra (10.1) corresponde ao dissipador que, analogamente à equação mestra de Lindblad (6.5), representa a interação do sistema com o reservatório térmico.

Assim, como próximo passo na continuidade do estudo de fenômenos de transporte (em sistemas quânticos), vamos aplicar o formalismo (10.1) para diversos sistemas de interesse nas áreas de mecânica estatística, matéria condensada e ótica quântica. De fato, dois modelos já foram estudados através dessa abordagem: uma cadeia de osciladores harmônicos quânticos acoplados [104], onde uma expressão para o fluxo de calor foi obtida analiticamente no regime de acoplamento fraco entre os osciladores da cadeia. Além disso, no limite clássico, foi recuperado

o resultado obtido por Rieder *et al.* [17] para a versão clássica do problema.

O outro modelo foi estudado pelo autor desta tese e consiste em uma extensão do modelo de Rabi [95], onde consideramos dois modos do campo eletromagnético no interior de uma cavidade ótica interagindo com um único átomo de dois níveis [105]. Esse sistema está representado na Figura 10.1.

Figura 10.1: Modelo generalizado de Rabi utilizado na referência [105]. Dois osciladores harmônicos de frequência ω estão interagindo com um sistema de dois níveis cuja frequência de transição é Ω . A interação entre o átomo e os osciladores é dada pelo parâmetro g .

O hamiltoniano do modelo é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell=1}^2 \left[\hbar\omega a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell} + \hbar g (a_{\ell}^{\dagger} + a_{\ell}) \sigma_x \right] + \frac{\hbar\Omega}{2} \sigma_z, \quad (10.4)$$

Usando as relações

$$a_{\ell} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x_{\ell} + \frac{i}{m\omega} p_{\ell} \right), \quad (10.5a)$$

$$a_{\ell}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x_{\ell} - \frac{i}{m\omega} p_{\ell} \right), \quad (10.5b)$$

o hamiltoniano (10.4) pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{m\omega^2}{2} (x_1^2 + x_2^2) + \hbar\epsilon (x_1 + x_2) \sigma_x + \frac{\hbar\Omega}{2} \sigma_z, \quad (10.6)$$

onde $\epsilon = (2m\omega/\hbar)^{1/2}$. Através da equação mestra (10.1), obtivemos, então, uma expressão analítica para o fluxo de calor ϕ no regime $\epsilon \ll 1$. A título de comparação, resolvemos o mesmo problema através de uma equação mestra de Lindblad, em que usamos os dissipadores para um único oscilador harmônico, conforme a expressão (8.23). Nesse caso, usamos o hamiltoniano na forma (10.4). Quando a diferença entre as temperaturas dos reservatórios $T_1 - T_2 = \Delta T$ é infinitesimal, obtivemos também a condutância térmica $\kappa = \phi/\Delta T$, tanto para dinâmica a FPK quântica, quanto para a dinâmica de Lindblad. Não mostraremos os resultados aqui, porém uma cópia do artigo [105] pode ser encontrada no Apêndice C.

Capítulo 10. Considerações Finais & Perspectivas

A seguir, pretendemos utilizar a dinâmica FPK quântica para estudar sistemas fisicamente mais ricos, como o modelo de Dicke e o modelo de Bose-Hubbard, já que estes apresentam transição de fase quântica.

Bibliografia

- [1] S. Harris, *An Introduction to the Theory of the Boltzmann Equation* (Dover Books on Physics, New York, 2004) (ver p. 1).
- [2] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Stochastic Dynamics and Irreversibility* (Springer, London, 2014) (ver pp. 1, 27, 69).
- [3] T. Tomé e M. J. de Oliveira, “Stochastic approach to equilibrium and nonequilibrium thermodynamics”, *Phys. Rev. E* **91**, 042140 (2015) (ver p. 1).
- [4] G. Lindblad, “On the generators of quantum dynamical semigroups”, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119–130 (1976) (ver pp. 1, 45, 61).
- [5] F. Petruccione e H.-P. Breuer, *The theory of open quantum systems* (Oxford University Press, New York, 2007) (ver pp. 1, 45, 77).
- [6] C. W. Gardiner e P. Zoller, *Quantum Noise*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 2010) (ver pp. 1, 45).
- [7] A. O. Caldeira e A. J. Leggett, “Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems”, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 211–214 (1981) (ver pp. 1, 43).
- [8] A. O. Caldeira, *An Introduction to Macroscopic Quantum Phenomena and Quantum Dissipation* (Cambridge University Press, Cambridge, 2014) (ver pp. 1, 43).
- [9] M. J. de Oliveira, “Quantum Fokker-Planck-Kramers equation and entropy production”, *Phys. Rev. E* **94**, 012128 (2016) (ver pp. 1, 130).
- [10] J.-B. J. Fourier, *Théorie analytique de la chaleur* (Didot, Paris, 1822) (ver pp. 2, 7).
- [11] A. Fick, “Ueber Diffusion”, *Ann. der Phys. und Chemie* **170**, 59–86 (1855); A. Fick, “On liquid diffusion”, *J. Memb. Sci.* **100**, 33–38 (1995), ver p. 2.
- [12] F. J. DiSalvo, “Thermoelectric Cooling and Power Generation”, *Science* **285**, 703–706 (1999) (ver p. 2).

Bibliografia

- [13] L. Onsager, “Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I.”, *Phys. Rev.* **37**, 405–426 (1931) (ver pp. 2, 48, 124, 126).
- [14] P. H. Guimarães, G. T. Landi e M. J. de Oliveira, “Thermal rectification in anharmonic chains under an energy-conserving noise”, *Phys. Rev. E* **92**, 062120 (2015) (ver p. 5).
- [15] Y. Dubi e M. D. Ventra, “Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions”, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 131–155 (2011) (ver p. 8).
- [16] F. Bonetto, J. L. Lebowitz e L. Rey-Bellet, “Fourier’s law: A challenge for theorists”, *arXiv math-ph/0002052v1* (2000) (ver p. 8).
- [17] Z. Rieder, J. L. Lebowitz e E. H. Lieb, “Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state”, *J. Math. Phys.* **8**, 1073 (1967) (ver pp. 8, 9, 131).
- [18] S. Lepri, R. Livi e A. Politi, “Heat Conduction in Chains of Nonlinear Oscillators”, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1896–1899 (1997) (ver p. 9).
- [19] S. Lepri, R. Livi e A. Politi, “Energy transport in anharmonic lattices close to and far from equilibrium”, *Phys. D* **119**, 140–147 (1998) (ver p. 9).
- [20] K. Aoki e D. Kusnezov, “Bulk properties of anharmonic chains in strong thermal gradients: Non-equilibrium ϕ^4 theory”, *Phys. Lett. Sect. A Gen. At. Solid State Phys.* **265**, 250–256 (2000) (ver pp. 10, 34).
- [21] M. Bolsterli, M. Rich e W. M. Visscher, “Simulation of nonharmonic interactions in a crystal by self-consistent reservoirs”, *Phys. Rev. A* **1**, 1086–1088 (1970) (ver p. 10).
- [22] F. Bonetto, J. L. Lebowitz e J. Lukkarinen, “Fourier’s law for a harmonic crystal with self-consistent stochastic reservoirs”, *J. Stat. Phys.* **116**, 783–813 (2004) (ver p. 10).
- [23] E. Pereira e R. Falcao, “Nonequilibrium statistical mechanics of anharmonic crystals with self-consistent stochastic reservoirs”, *Phys. Rev. E* **70**, 046105 (2004) (ver p. 10).
- [24] A. Dhar, K. Venkateshan e J. L. Lebowitz, “Heat conduction in disordered harmonic lattices with energy-conserving noise”, *Phys. Rev. E* **83**, 021108 (2011) (ver pp. 10, 35).
- [25] G. T. Landi e M. J. de Oliveira, “Fourier’s law from a chain of coupled anharmonic oscillators under energy-conserving noise”, *Phys. Rev. E* **87**, 052126 (2013) (ver pp. 10, 35, 39, 40).
- [26] G. T. Landi e M. J. de Oliveira, “Fourier’s law from a chain of coupled planar harmonic oscillators under energy-conserving noise”, *Phys. Rev. E* **89**, 022105 (2014) (ver pp. 10, 35, 39).
- [27] J. Lukkarinen, “Energy fluctuations, hydrodynamics and local correlations in harmonic systems with bulk noises”, *Phys. Scr.* **86**, 058507 (2012) (ver p. 11).

Bibliografia

- [28] S. Lepri, “Thermal conduction in classical low-dimensional lattices”, *Phys. Rep.* **377**, 1–80 (2003) (ver p. 11).
- [29] M. Buchanan, “Heated debate in different dimensions”, *Nat. Phys.* **1**, 71–71 (2005) (ver p. 11).
- [30] A. Dhar, “Heat transport in low-dimensional systems”, *Adv. Phys.* **57**, 457–537 (2008) (ver p. 11).
- [31] R. R. Ávila, “Propriedades não triviais do fluxo de calor via modelos microscópicos”, tese de doutorado (UFMG, 2013) (ver p. 11).
- [32] C. Starr, “The Copper Oxide Rectifier”, *Physics (College. Park. Md.)* **7**, 15 (1936) (ver pp. 12, 13, 37, 40).
- [33] N. A. Roberts e D. G. Walker, “A review of thermal rectification observations and models in solid materials”, *Int. J. Therm. Sci.* **50**, 648–662 (2011) (ver p. 12).
- [34] N. Li, J. Ren, L. Wang, G. Zhang, P. Hänggi e B. Li, “Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond”, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1045–1066 (2012) (ver p. 12).
- [35] M. Terraneo, M. Peyrard e G. Casati, “Controlling the Energy Flow in Nonlinear Lattices: A Model for a Thermal Rectifier”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 094302 (2002) (ver p. 12).
- [36] P. M. Morse, “Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels”, *Phys. Rev.* **34**, 57–64 (1929) (ver p. 12).
- [37] B. Li, L. Wang e G. Casati, “Thermal Diode: Rectification of Heat Flux”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 184301 (2004) (ver p. 12).
- [38] O. M. Braun e Y. S. Kivshar, “Nonlinear dynamics of the Frenkel–Kontorova model”, *Phys. Rep.* **306**, 1–108 (1998) (ver p. 12).
- [39] B. Li, J. Lan e L. Wang, “Interface Thermal Resistance between Dissimilar Anharmonic Lattices”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 104302 (2005) (ver p. 13).
- [40] B. Li, L. Wang e G. Casati, “Negative differential thermal resistance and thermal transistor”, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 143501 (2006) (ver p. 13).
- [41] J. Lan e B. Li, “Thermal rectifying effect in two-dimensional anharmonic lattices”, *Phys. Rev. B* **74**, 214305 (2006) (ver p. 13).
- [42] B. Hu, D. He, L. Yang e Y. Zhang, “Thermal rectifying effect in macroscopic size”, *Phys. Rev. E* **74**, 060201 (2006) (ver p. 13).

Bibliografia

- [43] B. Hu, L. Yang e Y. Zhang, “Asymmetric heat conduction in nonlinear lattices”, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 124302 (2006) (ver p. 13).
- [44] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar e A. Zettl, “Solid-state thermal rectifier.”, *Science* **314**, 1121–1124 (2006) (ver pp. 13, 37, 40).
- [45] W. Kobayashi, Y. Teraoka e I. Terasaki, “An oxide thermal rectifier”, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 171905 (2009) (ver pp. 13, 37, 40).
- [46] J. Hu, X. Ruan e Y. P. Chen, “Thermal conductivity and thermal rectification in graphene nanoribbons: a molecular dynamics study.”, *Nano Lett.* **9**, 2730–5 (2009) (ver pp. 13, 37, 40).
- [47] K. Joulain, Y. Ezzahri, J. Drevillon e P. Ben-Abdallah, “Modulation and amplification of radiative far field heat transfer: Towards a simple radiative thermal transistor”, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 133505 (2015) (ver pp. 13, 37, 40).
- [48] E. Pereira e R. R. Ávila, “Increasing thermal rectification: Effects of long-range interactions”, *Phys. Rev. E* **88**, 032139 (2013) (ver p. 13).
- [49] L. Verlet, “Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules”, *Phys. Rev.* **159**, 98–103 (1967) (ver p. 29).
- [50] P. O. J. Scherer, *Computational Physics Simulation of Classical and Quantum Systems* (Springer, Berlin, 2010) (ver p. 29).
- [51] N. Grønbech-Jensen e O. Farago, “A simple and effective Verlet-type algorithm for simulating Langevin dynamics”, *Mol. Phys.* **111**, 983–991 (2013) (ver p. 30).
- [52] P. H. Guimarães, G. T. Landi e M. J. de Oliveira, “Nonequilibrium quantum chains under multisite Lindblad baths”, *Phys. Rev. E* **94**, 032139 (2016) (ver pp. 41, 77).
- [53] T. M. Tritt, *Thermal conductivity: theory, properties and applications* (Kluwer Academic, Dordrecht, 2004) (ver p. 43).
- [54] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid state physics* (Cengage Learning, Boston, 1976) (ver pp. 43, 114).
- [55] G. Grosso e G. P. Parravicini, *Solid state physics*, 1st ed. (Academic Press, New York, 2000) (ver p. 43).
- [56] R. Landauer, “Electrical transport in open and closed systems”, *Z. Physik B - Condens. Matter* **68**, 217–228 (1987) (ver pp. 43, 48, 109).
- [57] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel e C. T. Foxon, “Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas”, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848–850 (1988) (ver pp. 43, 109, 110).

Bibliografia

- [58] H. M. Pastawski, “Classical and quantum transport from generalized landauer-büttiker equations”, *Phys. Rev. B* **44**, 6329–6339 (1991) (ver pp. 43, 109).
- [59] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997) (ver pp. 43, 47, 109).
- [60] J. Baringhaus, M. Ruan, F. Edler, A. Tejada, M. Sicot, A. Taleb-Ibrahimi, A.-P. Li, Z. Jiang, E. H. Conrad, C. Berger, C. Tegenkamp e W. A. de Heer, “Exceptional ballistic transport in epitaxial graphene nanoribbons”, *Nature* **506**, 349–354 (2014) (ver pp. 43, 109).
- [61] I. Bloch, “Ultracold quantum gases in optical lattices”, *Nat. Phys.* **1**, 23–30 (2005) (ver p. 43).
- [62] S. Diehl, A. Micheli, A. Kantian, B. Kraus, H. P. Buchler e P. Zoller, “Quantum states and phases in driven open quantum systems with cold atoms”, *Nat. Phys.* **4**, 878–883 (2008) (ver p. 43).
- [63] S. M. Rezende, “Theory of coherence in bose-einstein condensation phenomena in a microwave-driven interacting magnon gas”, *Phys. Rev. B* **79**, 174411 (2009) (ver p. 43).
- [64] A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga e B. Hillebrands, “Magnon spintronics”, *Nat. Phys.* **11**, 453–461 (2015) (ver pp. 43, 48).
- [65] I. Žutić, J. Fabian e S. D. Sarma, “Spintronics: Fundamentals and applications”, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323–410 (2004) (ver p. 43).
- [66] P. Högl, A. Matos-Abiad, I. Žutić e J. Fabian, “Magnetoanisotropic andreev reflection in ferromagnet-superconductor junctions”, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 116601 (2015) (ver p. 43).
- [67] R. Kubo, “Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems”, *J. Phys. Soc. Japan* **12**, 570–586 (1957) (ver p. 43).
- [68] G. D. Mahan, *Many-particle physics*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 2000) (ver p. 43).
- [69] A. Dhar e D. Roy, “Heat transport in harmonic lattices”, *J. Stat. Phys.* **125**, 801–820 (2006) (ver p. 44).
- [70] K. Saito e A. Dhar, “Fluctuation theorem in quantum heat conduction”, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 180601 (2007) (ver p. 44).
- [71] M. Bandyopadhyay e D. Segal, “Quantum heat transfer in harmonic chains with self-consistent reservoirs: exact numerical simulations”, *Phys. Rev. E* **84**, 011151 (2011) (ver p. 44).

Bibliografia

- [72] A. Purkayastha, A. Dhar e M. Kulkarni, “Out-of-equilibrium open quantum systems: a comparison of approximate quantum master equation approaches with exact results”, *Phys. Rev. A* **93**, 062114 (2016) (ver p. 44).
- [73] T. Prosen, “Third quantization: a general method to solve master equations for quadratic open Fermi systems”, en *New J. Phys.* **10**, 043026 (2008) (ver p. 45).
- [74] G. Benenti, G. Casati, T. Prosen, D. Rossini e M. Žnidarič, “Charge and spin transport in strongly correlated one-dimensional quantum systems driven far from equilibrium”, *Phys. Rev. B* **80**, 035110 (2009) (ver p. 45).
- [75] Y. Yan, C.-Q. Wu e B. Li, “Control of heat transport in quantum spin systems”, *Phys. Rev. B* **79**, 014207 (2009) (ver p. 45).
- [76] D. Karevski e T. Platini, “Quantum nonequilibrium steady states induced by repeated interactions”, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 207207 (2009) (ver pp. 45, 103, 115).
- [77] T. Prosen e M. Žnidarič, “Matrix product simulations of non-equilibrium steady states of quantum spin chains”, *J. Stat. Mech.* **2009**, P02035 (2009) (ver pp. 45, 47).
- [78] T. Platini, R. J. Harris e D. Karevski, “Fourier’s law on a one-dimensional optical random lattice”, *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 135003 (2010) (ver p. 45).
- [79] T. Prosen, “Open XXZ Spin Chain: Nonequilibrium Steady State and a Strict Bound on Ballistic Transport”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 217206 (2011) (ver p. 45).
- [80] M. Žnidarič, “Transport in a one-dimensional isotropic Heisenberg model at high temperature”, *J. Stat. Mech. Theory Exp.* **2011**, P12008 (2011) (ver p. 45).
- [81] M. Žnidarič, “Quantum transport in one-dimensional systems via a master equation approach: Numerics and an exact solution”, *M. Prmana - J. Phys.* **77**, 781–791 (2011) (ver p. 45).
- [82] D. Manzano, M. Tiersch, A. Asadian e H. J. Briegel, “Quantum transport efficiency and Fourier’s law”, *Phys. Rev. E* **86**, 061118 (2012) (ver pp. 45, 103).
- [83] T. Prosen e M. Žnidarič, “Diffusive high-temperature transport in the one-dimensional hubbard model”, *Phys. Rev. B* **86**, 125118 (2012) (ver p. 45).
- [84] D. Karevski, V. Popkov e G. M. Schütz, “Exact Matrix Product Solution for the Boundary-Driven Lindblad XXZ Chain”, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 047201 (2013) (ver p. 45).
- [85] V. Popkov e R. Livi, “Manipulating energy and spin currents in non-equilibrium systems of interacting qubits”, *New J. Phys.* **15**, 023030 (2013) (ver p. 45).

Bibliografia

- [86] J. J. Mendoza-Arenas, S. Al-Assam, S. R. Clark e D. Jaksch, “Heat transport in the XXZ spin chain: from ballistic to diffusive regimes and dephasing enhancement”, *J. Stat. Mech.* **2013**, P07007 (2013) (ver pp. 45, 47).
- [87] J. J. Mendoza-Arenas, T. Grujic, D. Jaksch e S. R. Clark, “Dephasing enhanced transport in nonequilibrium strongly correlated quantum systems”, *Phys. Rev. B* **87**, 235130 (2013) (ver p. 45).
- [88] G. T. Landi, E. Novais, M. J. de Oliveira e D. Karevski, “Flux rectification in the quantum XXZ chain”, *Phys. Rev. E* **90**, 042142 (2014) (ver p. 45).
- [89] J. J. Mendoza-Arenas, S. R. Clark e D. Jaksch, “Coexistence of energy diffusion and local thermalization in nonequilibrium XXZ spin chains with integrability breaking”, *Phys. Rev. E* **91**, 042129 (2015) (ver p. 45).
- [90] Z. Lenarčič e T. Prosen, “Exact asymptotics of the current in boundary-driven dissipative quantum chains in large external fields”, *Phys. Rev. E* **91**, 030103 (2015) (ver p. 45).
- [91] T. Prosen, “Matrix product solutions of boundary driven quantum chains”, *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 373001 (2015) (ver p. 45).
- [92] M. Žnidarič, “Relaxation times of dissipative many-body quantum systems”, *Phys. Rev. E* **92**, 042143 (2015) (ver p. 45).
- [93] G. T. Landi e D. Karevski, “Open Heisenberg chain under boundary fields: A magnonic logic gate”, *Phys. Rev. B* **91**, 174422 (2015) (ver p. 45).
- [94] A. Asadian, D. Manzano, M. Tiersch e H. J. Briegel, “Heat transport through lattices of quantum harmonic oscillators in arbitrary dimensions”, *Phys. Rev. E* **87**, 012109 (2013) (ver p. 46).
- [95] M. O. Scully e M. S. Zubairy, *Quantum Optics*, 1st ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1997) (ver pp. 46, 69, 70, 77, 131).
- [96] J. P. Santos e G. T. Landi, “Microscopic theory of a nonequilibrium open bosonic chain”, *Phys. Rev. E* **94**, 062143 (2016) (ver p. 47).
- [97] J. B. Parkinson e D. J. J. Farnell, *An Introduction to Quantum Spin Systems* (Springer, Berlin, 2010) (ver pp. 47, 50).
- [98] S. O. Demokritov, V. E. Demidov, O. Dzyapko, G. A. Melkov, A. A. Serga, B. Hillebrands e A. N. Slavin, “Bose-Einstein condensation of quasi-equilibrium magnons at room temperature under pumping”, *Nature* **443**, 430–433 (2006) (ver p. 48).

Bibliografia

- [99] H. Yoshizawa, G. Shirane, H. Shiba e K. Hirakawa, “Neutron scattering study of a one-dimensional XY antiferromagnet Cs_2CoCl_4 ”, *Phys. Rev. B* **28**, 3904–3908 (1983) (ver p. 49).
- [100] F. Levkovich-Maslyuk, “The bethe ansatz”, *J. Phys. A: Math. Theor.* **49**, 323004 (2016) (ver p. 49).
- [101] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, New York, 2011) (ver p. 56).
- [102] P. Pearle, “Simple derivation of the lindblad equation”, *Eur. J. Phys.* **33**, 805 (2012) (ver p. 77).
- [103] C. A. Brasil, F. F. Fanchini e R. d. J. Napolitano, “A simple derivation of the Lindblad equation”, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **35**, 01–09 (2013) (ver p. 77).
- [104] M. J. de Oliveira, “Heat transport along a chain of coupled quantum harmonic oscillators”, *Phys. Rev. E* **95**, 042113 (2017) (ver p. 130).
- [105] P. H. Guimarães, G. T. Landi e M. J. de Oliveira, “Thermal conductance of a two-level atom coupled to two quantum harmonic oscillators”, *Phys. Rev. E* **95**, 042108 (2017) (ver p. 131).

Apêndice A

Evolução Temporal de $\langle \mathcal{H} \rangle$

A fim de demonstrarmos o resultado (3.34), vamos calcular a evolução temporal do valor médio do hamiltoniano $\mathcal{H}$ através da equação de Fokker-Planck (3.20), dada por

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \sum_{i=1}^L \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i P) + \frac{\partial}{\partial v_i} [(f_i - \gamma_i v_i) P] \right\} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L \Gamma_i^2 \frac{\partial^2 P}{\partial v_i^2} \quad (\text{A.1})$$

Apesar de termos a forma explícita do hamiltoniano do sistema, dada por (4.1), faremos o cálculo para um hamiltoniano mais geral, do tipo (3.1):

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^L \left[\frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_i) \right] + \sum_{i=1}^{L-1} U(x_i - x_{i+1}). \quad (\text{A.2})$$

Primeiro, definimos o valor médio de uma grandeza $A = A(x, v, t)$ como sendo

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} P(x, v, t) A(x, v, t) dx dv, \quad (\text{A.3})$$

onde usamos a notação $x = (x_1, x_2, \dots, x_L)$, $v = (v_1, v_2, \dots, v_L)$ e equivalentemente, $dx = dx_1 dx_2 \dots dx_L$, $dv = dv_1 dv_2 \dots dv_L$. Em seguida, multiplicamos a equação (A.1) por $\mathcal{H}$. O lado esquerdo dessa expressão fica¹

$$\iint \frac{\partial P}{\partial t} \mathcal{H} dx dv = \frac{\partial}{\partial t} \iint P \mathcal{H} dx dv = \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial t}, \quad (\text{A.4})$$

onde, na última igualdade, usamos a definição (A.3).

Para calcular os termos do lado direito que envolvem derivadas, usamos integração por

¹A partir de agora, vamos suprimir os limites de integração para não sobrecarregar a notação.

partes seguida da definição (A.3):

$$\iint \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i P) \mathcal{H} dx dv = - \iint v_i P \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} dx dv = - \left\langle v_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} \right\rangle, \quad (\text{A.5a})$$

$$\iint f_i \frac{\partial P}{\partial v_i} \mathcal{H} dx dv = - \iint f_i P \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} dx dv = - \left\langle f_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} \right\rangle, \quad (\text{A.5b})$$

$$\iint \frac{\partial}{\partial v_i} (v_i P) \mathcal{H} dx dv = - \iint v_i P \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} dx dv = - \left\langle v_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} \right\rangle. \quad (\text{A.5c})$$

É importante observar que os termos de fronteira das expressões (A.5) acima, $v_i P \mathcal{H}$ e $f_i P \mathcal{H}$, se anulam nos limites $\pm\infty$, pois assumimos que a distribuição de probabilidades $P(x, v, t)$ seja uma função “bem comportada”, já que ela representa um sistema fisicamente plausível. Para o termo envolvendo a derivada segunda, realizamos duas integrações por partes:

$$\begin{aligned} \iint \frac{\partial^2 P}{\partial v_i^2} \mathcal{H} dx dv_i &= - \iint \frac{\partial P}{\partial v_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} dx dv_i \\ &= \iint P \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial v_i^2} dx dv_i \\ &= \left\langle \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial v_i^2} \right\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

em que os termos de fronteira $\mathcal{H} \partial P / \partial v_i$ e $P \partial \mathcal{H} / \partial v_i$ também se anulam nos limites de integração e novamente utilizamos a definição de valor médio.

Equacionando os termos (A.4), (A.5) e (A.6) obtemos

$$\frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial t} = \sum_{i=1}^L \left[\left\langle v_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} \right\rangle + \left\langle f_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} \right\rangle - \gamma_i \left\langle v_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} \right\rangle + \frac{\Gamma_i^2}{2} \left\langle \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial v_i^2} \right\rangle \right]. \quad (\text{A.7})$$

Utilizando os resultados

$$m_i f_i = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} = m_i v_i, \quad \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial v_i^2} = m_i, \quad (\text{A.8})$$

chegamos a

$$\frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial t} = \sum_{i=1}^L \left[\frac{\Gamma_i^2}{2} - \gamma_i \langle v_i^2 \rangle \right] m_i. \quad (\text{A.9})$$

Lembrando que apenas as partículas das extremidades estão em contato com os reservatórios térmicos, temos que Γ_i e γ_i são nulos exceto para $i = 1$ e $i = L$, onde valem respectivamente

$\Gamma_1^2 = 2\alpha k_B T_A / m_1^2$, $\gamma_1 = \alpha / m_1$ e $\Gamma_L^2 = 2\alpha k_B T_B / m_L^2$, $\gamma_L = \alpha / m_L$. Dessa forma, a equação (A.9) se torna

$$\frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial t} = \alpha \left[\frac{k_B T_A}{m_1} - \langle v_1^2 \rangle \right] + \alpha \left[\frac{k_B T_B}{m_L} - \langle v_L^2 \rangle \right], \quad (\text{A.10})$$

onde prontamente identificamos os termos $\langle j_{1,A} \rangle$ e $\langle j_{L,B} \rangle$, conforme o resultado (3.34).

Apêndice B

Código Fonte: Sistemas Clássicos

```
1  /*****
2  *
3  *
4  *   MEMBER FUNCTIONS OF FourierChain CLASS
5  *
6  *
7  *****/
8
9  // harmonic and anharmonic forces
10 void FourierChain::forces()
11 {
12     int half;
13
14     double x1, x2;
15
16     half = L/2;
17
18     // first particle
19     x1 = x[0];
20     x2 = x[1] - x[0];
21
22     fr[0] = k1*x2;
23     f[0]  = -k1*x1 + fr[0];
24
25     // inner particles
26     for(int i=1; i<(L-1); i++) {
27
28         x2 = x[i+1] - x[i];
29
30         fr[i] = k1*x2;
31         f[i]  = -fr[i-1] + fr[i];
32
33     }
34 }
```

Apêndice B. Código Fonte: Sistemas Clássicos

```
35 // last particle
36 x2 = -x[L-1];
37
38 fr[L-1] = k1*x2;
39 f[L-1] = -fr[L-2] + fr[L-1];
40
41 // adding pinning term (full chain)
42 for (int i=0; i<(L/2); i++) {
43
44     f[i] += -q*x[i]*x[i]*x[i];
45     f[i+half] += -r*x[i+half]*x[i+half]*x[i+half];
46
47 }
48
49 }
50
51 // energy-conserving noise
52 void FourierChain::flip()
53 {
54     for (int i=0; i<L; i++) {
55         timer[i] += dt;
56         if (timer[i] > endI[i]) {
57             v[i] = -v[i];
58             timer[i] = 0.0;
59             endI[i] = exp_dev(mt);
60
61         }
62     }
63
64 }
65
66 // verlet integrator step
67 void FourierChain::verlet_step()
68 {
69     double sigmaA, sigmaB;
70
71     // white noise
72     sigmaA = gauss_dev(mt);
73     sigmaB = gauss_dev(mt);
74
75     betaA = gammaA*sigmaA;
76     betaB = gammaB*sigmaB;
77
78     // update positions
79     x[0] += bA*v[0]*dt + 0.5*(bA*f[0]*dt*dt)/mass[0] \
80         + 0.5*(bA*dt*betaA)/mass[0];
81
82     for (int i=1; i<(L-1); i++) {
83
84         x[i] += dt*v[i] + 0.5*(dt*dt*f[i])/mass[i];
85
86     }
```



```

86 }
87
88 x[L-1] += bB*v[L-1]*dt + 0.5*(bB*f[L-1]*dt*dt)/mass[L-1] \
89           + 0.5*(bB*dt*betaB)/mass[L-1];
90
91 // update forces
92 copy(f, f+L, fold);
93 forces();
94
95 // update velocities
96 v[0] = aA*v[0] + 0.5*dt*(aA*fold[0] + f[0])/mass[0] \
97           + (bA*betaA)/mass[0];
98
99 for (int i=1; i<(L-1); i++) {
100     v[i] += 0.5*dt*(fold[i] + f[i])/mass[i];
101 }
102
103 v[L-1] = aB*v[L-1] + 0.5*dt*(aB*fold[L-1] + f[L-1])/mass[L-1] \
104           + (bB*betaB)/mass[L-1];
105
106 }
107
108 // transient evolution
109 void FourierChain::transient()
110 {
111
112     long int c;
113
114     //setting initial conditions for x and v
115     for (int i=0; i<L; i++) {
116         x[i] = 1.0*sin(M_PI*(i+1)/(L));
117         v[i] = sqrt(TA + (TB-TA)*i/(L-1));
118     }
119
120     forces();
121
122     //transient evolution
123     c = ceil(tb/dt);
124
125     // evolution if noise is 'on'
126     if (noise) {
127         for (int i=0; i<L; i++) {
128             timer[i] = 0.0;
129             endI[i] = exp_dev(mt)/lambda;
130         }
131
132         while (c-->0) {
133             verlet_step();
134             flip();
135         }
136     }

```

```

137
138 // evolution if noise is 'off'
139 else {
140     while (c--) {
141         verlet_step();
142     }
143 }
144
145
146 }
147
148 // stationary state & average calculations
149 void FourierChain::stationary()
150 {
151     long int c;
152
153     c = ceil(ts/dt);
154
155     // evolution if noise is 'on'
156     if (noise) {
157         while (c--) {
158             verlet_step();
159             flip();
160
161             for (int i=0; i<(L-1); i++) {
162                 J[i] += -0.5*fr[i]*(v[i]+v[i+1]);
163             }
164
165             for (int i=0; i<L; i++) {
166                 v2[i] += v[i]*v[i];
167             }
168
169         }
170     }
171
172     // evolution if noise is 'off'
173     else {
174         while (c--) {
175             verlet_step();
176
177             for (int i=0; i<(L-1); i++) {
178                 J[i] += -0.5*fr[i]*(v[i]+v[i+1]);
179             }
180
181             for (int i=0; i<L; i++) {
182                 v2[i] += v[i]*v[i];
183             }
184
185         }
186     }
187

```

```

188     for (int i=0; i<(L-1); i++) {
189         fluxM    += J[i]/(L-1);
190     }
191
192 }
193
194 // print results to a file
195 void FourierChain::fileprint()
196 {
197     long int c;
198     long double Jmed, varJ;
199
200     c = ceil(ts/dt);
201
202     // calculates average flux and std dev.
203     Jmed = 0.0;
204     for (int i=0; i<(L-1); i++) {
205         Jmed += J[i]/c/(L-1);
206     }
207
208     cout << scientific << Jmed << "\n" << sqrt(varJ) << endl;
209
210 }

```


Apêndice C

Publicações

As publicações nas quais esta tese foi baseada estão anexadas a seguir.

Thermal rectification in anharmonic chains under an energy-conserving noise

Pedro H. Guimarães,¹ Gabriel T. Landi,² and Mário J. de Oliveira¹

¹*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05314-970 São Paulo, Brazil*

²*Universidade Federal do ABC, 09210-580 Santo André, Brazil*

(Received 28 January 2015; revised manuscript received 28 July 2015; published 10 December 2015)

Systems in which the heat flux depends on the direction of the flow are said to present thermal rectification. This effect has attracted much theoretical and experimental interest in recent years. However, in most theoretical models the effect is found to vanish in the thermodynamic limit, in disagreement with experiment. The purpose of this paper is to show that the rectification may be restored by including an energy-conserving noise which randomly flips the velocity of the particles with a certain rate λ . It is shown that as long as λ is nonzero, the rectification remains finite in the thermodynamic limit. This is illustrated in a classical harmonic chain subject to a quartic pinning potential (the Φ^4 model) and coupled to heat baths by Langevin equations.

DOI: [10.1103/PhysRevE.92.062120](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.062120)

PACS number(s): 05.70.Ln, 05.10.Gg, 05.60.-k

I. INTRODUCTION

When a system is placed between two reservoirs maintained at different temperatures, a heat current J is established from the hotter reservoir to the colder. For most materials, this current is independent of the direction of the flow. But if the material is asymmetric, this may not be the case. When the heat current depends on the direction of the flow, we say the system presents *thermal rectification* (in analogy with the electric rectification of diodes). This topic has recently been the subject of intensive investigations [1–28], motivated in part by the possibility of constructing devices operating exclusively with heat current (for reviews, see Refs. [29,30]).

There are at least two key ingredients to the existence of thermal rectification. The first is an inherent asymmetry of the system which breaks the invariance under bath reversal. The second is a temperature dependence of the thermal conductivity, which is necessary to induce an overlap between the phonon spectra of the left and right parts of the system [3,16]. This is the reason why the classical harmonic chain [31] presents no rectification, irrespective of any asymmetries present.

In the thermodynamic limit, however, these two ingredients may not suffice to maintain a finite rectification. Indeed, most theoretical models and numerical simulations predict a rectification that vanishes in the thermodynamic limit, i.e., for a macroscopically large sample. This is in clear disagreement with experiment [9–12,26,32–34].

The purpose of this paper is to show that this discrepancy may be resolved by including an additional energy-conserving noise. This noise represents the weak interaction between the system and other degrees of freedom that are always present in real solids. It therefore serves as an *ad hoc* implementation of the extraordinary complexity of real systems. In the past it was used to solve the problem of anomalous heat conduction [35–40]: The harmonic chain coupled to two baths at different temperatures has a ballistic heat flow [31], but when this noise is included the flux becomes diffusive, as expected from Fourier's law. The idea of an energy-conserving noise is also extensively used in quantum optics, where it is referred to as dephasing [41]. In either case, the assumption that the noise is energy conserving is justified when the coupling to the additional degrees of freedom is weak.

There are several ways to implement the energy-conserving noise. One is through self-consistent reservoirs [35,36]: All particles in the system are coupled to auxiliary Langevin baths at different temperatures, which are adjusted so that in the steady state no heat flows through them. The implementation which will be used here was first proposed in Ref. [38] by Dhar, Venkateshan, and Lebowitz and was also studied by some of us in Refs. [39,40]. It is somewhat similar to the noise studied by Bernardin and Olla in Ref. [37]. The idea is that the particles in the system may suffer elastic collisions with other degrees of freedom, whose effect is to randomly rotate the velocity vector of each particle by a small (random) angle. Since the kinetic energy depends only on the magnitude of the velocity, this conserves the kinetic energy and therefore the total energy of the system.

In one-dimensional models, only rotations by π are allowed so the noise is implemented by randomly changing the sign of the velocity ($v \rightarrow -v$) with a certain rate λ . The dynamics of the velocity-flipping model are substantially different from that of the self-consistent reservoirs. Notwithstanding, it has been shown by Lukkarinen that both have the same steady state [42]. Finally, we mention that in quantum systems the noise is usually implemented using the Lindblad master equation. For a recent example involving quantum transport, see Ref. [43].

The rectification may be quantified as follows. Let J denote the heat flux over a given bath configuration and J' the corresponding flux obtained by reversing the baths. We define the rectification coefficient as

$$R = \frac{|J| - |J'|}{|J| + |J'|}. \quad (1)$$

It is zero when there is no rectification and ± 1 when one direction acts as a perfect heat insulator.

In this paper we will show that including an energy-conserving noise leads to a finite rectification effect in the thermodynamic limit. We will consider the problem of a classical asymmetric harmonic chain with quartic (Φ^4) pinning interaction and coupled to Langevin heat baths kept at different temperatures. It will be shown that without the energy-conserving noise R tends to zero in the thermodynamic limit. But for any nonzero noise, R tends to a finite value.

It is worth emphasizing that these numerical simulations are computationally very expensive, due mainly to three reasons.

First, the rectification is much more sensitive to numerical fluctuations than the heat flux. Second, the energy-conserving noise requires the generation of a large number of random numbers. Finally, in the presence of the energy-conserving noise the number of statistical averages required to obtain a good convergence increases substantially. Hence our choice of focusing on a specific model. Notwithstanding, we have also observed a similar behavior for other mechanical models, such as the Fermi-Pasta-Ulam and the Frenkel-Kontorova models. And in all cases the results are unambiguous: The presence of the energy-conserving noise leads to a finite rectification in the thermodynamic limit.

II. MODEL

We propose to study a chain of L particles with unit masses described by coordinates x_i and velocity v_i associated to the Hamiltonian

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L v_i^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=0}^L (x_i - x_{i+1})^2 + \frac{g_L}{4} \sum_{i=1}^{L/2} x_i^4 + \frac{g_R}{4} \sum_{i=\frac{L}{2}+1}^L x_i^4 \quad (2)$$

with fixed boundary conditions, $x_0 = x_{L+1} = 0$. In addition to the nearest-neighbor harmonic interaction, the chain is also subject to a quartic pinning term which is different for the left and right halves of the chain. In this model the quartic pinning acts as both the asymmetry (when $g_L \neq g_R$) and the anharmonicity (to ensure a temperature dependence of the thermal conductivity).

The system is connected to two heat baths placed at the ends of the chain and modeled by Langevin equations. The equations of motion are, therefore,

$$m \frac{dv_1}{dt} = F_1 - \alpha v_1 + \sqrt{2\alpha T_A} \xi_1(t), \quad (3)$$

$$m \frac{dv_i}{dt} = F_i, \quad i = 2, \dots, L-1, \quad (4)$$

$$m \frac{dv_L}{dt} = F_L - \alpha v_L + \sqrt{2\alpha T_B} \xi_L(t), \quad (5)$$

where $F_i = -\partial H / \partial x_i$ is the force acting on particle i , α is the damping constant, and ξ_i are independent standard Gaussian white noises. The temperatures of the two reservoirs, A and B , are denoted by T_A and T_B (and $k_B = 1$).

In addition to the baths, all particles are subject to an energy-conserving noise that randomly flips the velocity of each particle with a rate λ . The effects of this noise are best seen in terms of the master equation for the probability distribution $P(x, v, t)$, where $x = (x_1, \dots, x_L)$ and $v = (v_1, \dots, v_L)$. It reads

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \mathcal{L}P + \lambda \sum_{i=1}^L [P(v^i) - P(v)], \quad (6)$$

where $v^i = (v_1, \dots, -v_i, \dots, v_L)$ and

$$\mathcal{L}P = - \sum_i \left\{ \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial v_i} (F_i P - \alpha_i v_i P) - \frac{\partial(v_i P)}{\partial x_i} + \frac{\alpha_i T_i}{m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial v_i^2} \right\}$$

is the usual Fokker-Planck operator containing the Langevin dynamics, with $\alpha_1 = \alpha_N = \alpha$ and $\alpha_i = 0$ otherwise. We also have $T_1 = T_A$ and $T_N = T_B$.

Since the noise conserves the total energy, the rate of change of H should only be affected by the Langevin reservoirs. Indeed, using Eq. (6) one arrives at

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle = J_A - J_B, \quad (7)$$

where

$$J_A = \alpha (T_A - \langle v_1^2 \rangle), \quad (8)$$

$$J_B = -\alpha (T_B - \langle v_L^2 \rangle) \quad (9)$$

are the fluxes from the left and right baths, respectively. In the steady state $J_A = J_B := J$.

It is worth mentioning that from a computational perspective, it is more efficient to compute the heat flux from the formula

$$J_i = k \langle v_i (x_i - x_{i+1}) \rangle, \quad (10)$$

which corresponds to the heat from site i to site $i+1$. The reason is that in Eqs. (8) and (9), quantities such as $T_A - \langle v_1^2 \rangle$ are extremely small and therefore prone to numerical fluctuations.

We also note that the existence of a heat current entails a continuous production of entropy. In the steady state, the entropy production rate is given by [44]

$$\Pi = J \left(\frac{1}{T_B} - \frac{1}{T_A} \right). \quad (11)$$

Thus, if both temperatures are equal, no entropy is produced, even in the presence of the energy-conserving noise.

III. NUMERICAL SIMULATIONS

The Langevin equations (3)–(5) were integrated numerically to obtain the heat flux in Eq. (10). For the inner particles we used the velocity-Verlet algorithm [45], and for the boundary particles we use the stochastic-Verlet algorithm developed in Ref. [46]. The action of the energy-conserving noise is as follows. Let Δt be the time step of the integration. For each particle, at each time step, we flip the velocity of the particle with probability $p = \lambda \Delta t$. This is a Poisson process which generates a geometric distribution with discrete waiting time $p(1-p)^\ell$, where ℓ is an integer. In the continuous limit this tends to an exponential distribution $\lambda e^{-\lambda t}$. A more efficient implementation is the following. For each particle, draw a random number τ_i from an exponential distribution with parameter λ . At each time step decrease each τ_i by Δt . Reverse the velocity when τ_i becomes negative and, afterwards, draw a new τ_i . The results are of course the same, but this requires the generation of less random numbers, while allowing for a larger Δt to be used without loss of accuracy.

In what follows we fix the spring constant at $k = 1$ and the damping term at $\alpha = 0.1$. Moreover, to investigate the thermal rectification we consider $(T_A, T_B) = (1.8, 0.2)$ and $(0.2, 1.8)$. The corresponding fluxes will be referred to as J and J' , respectively. Finally, as for the quartic pinning terms, we will

FIG. 1. (Color online) Heat fluxes J (filled points) and J' (open points) for $(g_L, g_R) = (0, 5)$. (a) As a function of L for different values of λ . (b) As a function of λ for different values of L . In both cases the dashed lines represent slope -1 .

consider two situations: $(g_L, g_R) = (0, 5)$ and $(1, 5)$. Note that in the first situation the left chain is harmonic.

We start with $(g_L, g_R) = (0, 5)$. Figure 1 shows both J and J' (filled and open points, respectively) as a function of L and λ . In Fig. 1(a) we see that for sufficiently large L the flux is diffusive, behaving as $J \sim 1/L$. This is of course expected since both the quartic pinning [47] and the energy-conserving noise [38–40] are known to lead to Fourier’s law. A similar behavior is also observed for J as a function of λ , as seen in Fig. 1(b). This is in agreement with what was found Refs. [39,40]. Hence, we conclude that if both λ and L are sufficiently large, the flux behaves as

$$J = \frac{b}{\lambda L} \quad (12)$$

with different coefficients b and b' for J and J' , respectively.

The existence of rectification and the role played by the energy-conserving noise may be visualized quite clearly in Fig. 1(a). When $\lambda = 0$ the fluxes J and J' are first distinct when L is small but gradually approach one another as L becomes large. This is the behavior found in most models of thermal rectification, and it shows clearly that the rectification vanishes in the thermodynamic limit. Conversely, when λ is large, a finite separation between J and J' remains for any size

FIG. 2. (Color online) Rectification coefficient R computed from Eq. (1) and the data of Fig. 1. (a) As a function of L for different values of λ . (b) As a function of λ for different values of L . The dotted line in (b) corresponds to the value $R^* = 0.073$ which the curves for all sizes tend to when λ is sufficiently large.

considered. Hence, for any nonzero λ the rectification remains *finite* in the thermodynamic limit.

A more quantitative analysis may be done by computing the rectification coefficient in Eq. (1). The results are shown in Fig. 2. It is important to mention that accurately computing R is an extremely challenging task. First, it involves taking the difference between two fluctuating quantities. Second, since $J \propto 1/L$, the fluxes are already quite small when L is large. Finally, the statistical fluctuations increase substantially with λ .

Let us first analyze Fig. 2(a), where R is plotted as a function of L for several values of λ . When $\lambda = 0$ the rectification is initially large but then goes down with L and tends to zero in the thermodynamic limit. As λ increases, however, one observes that for large L the rectification settles at a nonzero value. If λ is sufficiently large the rectification even becomes roughly independent of size.

Similar conclusions may be drawn from Fig. 2(b), where we plot R as a function of λ for several sizes. If we look at the low λ region we see that R diminishes quickly from $R \sim 0.15$ to zero as L increases. But for large λ all curves are found to approach a common value of roughly $R^* \simeq 0.073$.

In the situation considered so far, the left part of the chain was actually harmonic, since there is no pinning term

FIG. 3. (Color online) (a) Heat fluxes and (b) thermal rectification as a function of L , for $(g_L, g_R) = (1, 5)$ and two values of λ .

($g_L = 0$). To show that this does not influence the main effect of the energy-conserving noise, we now consider a condition in which $g_L \neq 0$. In Fig. 3 we plot the fluxes and the corresponding rectification coefficient for $(g_L, g_R) = (1, 5)$. As can be seen, the conclusions are all identical to the previous case: when $\lambda = 0$ (black circles) the rectification clearly tends to zero as L increases. Conversely, when $\lambda = 0.03$ (red squares), the rectification remains finite for any size.

IV. DISCUSSION AND CONCLUSIONS

The rectification effect in the studied models exist for both with ($\lambda \neq 0$) and without ($\lambda = 0$) the energy-conserving noise. But their dependence on the size L of the system is entirely different in either case. Note that even when $\lambda = 0$ the model presents a diffusive heat flux so to leading order we may write

$$|J| = \frac{A}{L}, \quad |J'| = \frac{A'}{L},$$

which, from Eq. (1), implies a rectification coefficient

$$R = \frac{A - A'}{A + A'}.$$

Our results show that when $\lambda = 0$, $A' = A$ and hence the rectification is zero. The existence of a nonzero energy-conserving noise therefore ensures a finite rectification.

When $\lambda = 0$ we may have, for instance, a situation where

$$|J| = \frac{A}{L} + \frac{B}{L^2}, \quad |J'| = \frac{A}{L} + \frac{B'}{L^2},$$

which, for large L , would lead to a rectification coefficient

$$R = \frac{B - B'}{2AL}.$$

Since $R \propto 1/L$, the effect becomes negligible in the thermodynamic limit.

Thermal rectification has been measured experimentally in macroscopic systems [9–12, 26, 32–34], which is understood as a very large system from the microscopic viewpoint. Thus, if we wish to compare the results of a microscopic model with experiment, we understand that the thermodynamic limit should be taken. However, in most theoretical models, the magnitude of the effect vanishes in the thermodynamic limit.

The purpose of this paper was to show that including an energy-conserving noise leads to a finite rectification in the thermodynamic limit. To illustrate this we studied the problem of two classical anharmonic chains with different pinning coefficients. But we have also studied other classical models, such as the Frenkel-Kontorova and Fermi-Pasta-Ulam (results not shown). In all cases, the results are unambiguous: A nonzero noise leads to a finite rectification in the thermodynamic limit. These results therefore lead to the conjecture that the existence of a finite rectification in the presence of the energy-conserving noise may be a universal behavior, independent of the underlying mechanical model. Last, we mention that the physical explanation of this effect, although not trivial, is certainly related to the highly chaotic behavior of the energy-conserving noise, which makes the system ergodic [40].

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the São Paulo Research Foundation (FAPESP) and CNPq for the financial support.

- [1] B. Hu, L. Yang, and Y. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 124302 (2006).
- [2] M. Terraneo, M. Peyrard, and G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 094302 (2002).
- [3] B. Li, L. Wang, and G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 184301 (2004).

- [4] E. Pereira and R. Falcao, *Phys. Rev. E* **70**, 046105 (2004).
- [5] B. Li, J. Lan, and L. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 104302 (2005).
- [6] L. Wang and B. Li, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 177208 (2007).
- [7] W. C. Lo, L. Wang, and B. Li, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 054402 (2008).
- [8] E. Pereira and H. C. F. Lemos, *Phys. Rev. E* **78**, 031108 (2008).

- [9] R. Scheibner, M. König, D. Reuter, A. D. Wieck, C. Gould, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *New J. Phys.* **10**, 083016 (2008).
- [10] J. Hu, X. Ruan, and Y. P. Chen, *Nano Lett.* **9**, 2730 (2009).
- [11] W. Kobayashi, Y. Teraoka, and I. Terasaki, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 171905 (2009).
- [12] N. Yang, G. Zhang, and B. Li, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 033107 (2009).
- [13] L. Zhang, Y. Yan, C.-Q. Wu, J.-S. Wang, and B. Li, *Phys. Rev. B* **80**, 172301 (2009).
- [14] E. Pereira, *Phys. Lett. A* **374**, 1933 (2010).
- [15] E. Pereira, *Phys. Rev. E* **82**, 040101 (2010).
- [16] E. Pereira, *Phys. Rev. E* **83**, 031106 (2011).
- [17] E. Pereira, H. C. F. Lemos, and R. R. Ávila, *Phys. Rev. E* **84**, 061135 (2011).
- [18] T. N. Shah and P. Gajjar, *Phys. Lett. A* **376**, 438 (2012).
- [19] J. Wang, E. Pereira, and G. Casati, *Phys. Rev. E* **86**, 010101(R) (2012).
- [20] E. Pereira and R. R. Ávila, *Phys. Rev. E* **88**, 032139 (2013).
- [21] J. Thingna and J.-S. Wang, *Europhys. Lett.* **104**, 37006 (2013).
- [22] R. R. Ávila and E. Pereira, *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 055002 (2013).
- [23] M. Romero-Bastida and J. M. Arizmendi-Carvajal, *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 115006 (2013).
- [24] T. Werlang, M. A. Marchiori, M. F. Cornelio, and D. Valente, *Phys. Rev. E* **89**, 062109 (2014).
- [25] V. Kubytskyi, S.-A. Biehs, and P. Ben-Abdallah, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 074301 (2014).
- [26] E. Nefzaoui, K. Joulain, J. Drevillon, and Y. Ezzahri, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 103905 (2014).
- [27] G. T. Landi, E. Novais, M. J. de Oliveira, and D. Karevski, *Phys. Rev. E* **90**, 042142 (2014).
- [28] G. T. Landi and D. Karevski, *Phys. Rev. B* **91**, 174422 (2015).
- [29] N. A. Roberts and D. G. Walker, *Intl. J. Thermal Sci.* **50**, 648 (2011).
- [30] N. Li, J. Ren, L. Wang, G. Zhang, P. Hänggi, and B. Li, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1045 (2012).
- [31] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, *J. Math. Phys.* **8**, 1073 (1967).
- [32] C. Starr, *J. Appl. Phys.* **7**, 15 (1936).
- [33] W. H. Brattain, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 203 (1951).
- [34] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and A. Zettl, *Science* **314**, 1121 (2006).
- [35] M. Bolsterli, M. Rich, and W. M. Visscher, *Phys. Rev. A* **1**, 1086 (1970).
- [36] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, and J. Lukkarinen, *J. Stat. Phys.* **116**, 783 (2004).
- [37] C. Bernardin and S. Olla, *J. Stat. Phys.* **121**, 271 (2005).
- [38] A. Dhar, K. Venkateshan, and J. L. Lebowitz, *Phys. Rev. E* **83**, 021108 (2011).
- [39] G. T. Landi and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **89**, 022105 (2014).
- [40] G. T. Landi and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **87**, 052126 (2013).
- [41] C. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise*, 3rd ed. (Springer, New York, 2004), p. 450.
- [42] J. Lukkarinen, *Phys. Scr.* **86**, 058507 (2012).
- [43] A. Asadian, D. Manzano, M. Tiersch, and H. J. Briegel, *Phys. Rev. E* **87**, 012109 (2013).
- [44] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **82**, 021120 (2010).
- [45] L. Verlet, *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967).
- [46] N. Grønbech Jensen and O. Farago, *Mol. Phys.* **111**, 983 (2013).
- [47] K. Aoki and D. Kusnezov, *Ann. Phys.* **295**, 50 (2002), arXiv:hep-ph/0002160; K. Aoki, J. Lukkarinen, and H. Spohn, *J. Stat. Phys.* **124**, 1105 (2006), arXiv:cond-mat/0602082.

Nonequilibrium quantum chains under multisite Lindblad baths

Pedro H. Guimarães,¹ Gabriel T. Landi,^{2,*} and Mario J. de Oliveira¹

¹*Instituto de Física da Universidade de São Paulo, 05314-970 São Paulo, Brazil*

²*Universidade Federal do ABC, 09210-580 Santo André, Brazil*

(Received 14 May 2016; revised manuscript received 13 August 2016; published 30 September 2016)

We study a quantum XX chain coupled to two heat reservoirs that act on multiple sites and are kept at different temperatures and chemical potentials. The baths are described by Lindblad dissipators, which are constructed by direct coupling to the fermionic normal modes of the chain. Using a perturbative method, we are able to find analytical formulas for all steady-state properties of the system. We compute both the particle or magnetization current and the energy current, both of which are found to have the structure of Landauer's formula. We also obtain exact formulas for the Onsager coefficients. All properties are found to differ substantially from those of a single-site bath. In particular, we find a strong dependence on the intensity of the bath couplings. In the weak-coupling regime, we show that the Onsager reciprocal relations are satisfied.

DOI: [10.1103/PhysRevE.94.032139](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.032139)

I. INTRODUCTION

When a system is placed in contact with two reservoirs maintained at different temperatures or chemical potentials, it will usually tend to a nonequilibrium steady state (NESS) characterized by the presence of finite currents between the two baths. This physical scenario includes a wide range of important problems in condensed matter physics, with the most traditional examples being measurements of thermal conductivity [1] and electron transport in metals and semiconductors [2,3]. However, it also encompasses many other problems, such as ballistic transport of electrons in mesoscopic devices [4–8], hopping of ultracold atoms in optical lattices [9–11], magnon transport in YIG crystals [12–14], and spintronics [15,16].

Having a robust theoretical framework to study the properties of the NESS is therefore of importance to a broad range of areas. However, this is usually an extremely difficult endeavor, due mainly to two reasons. First, the problem is heavily dependent on the possible scattering mechanisms that may affect the current-carrying excitations, an effect that is usually modeled using Boltzmann's equation [1,3,17], Kubo's linear response formula [17–19], or the Landauer-Büttiker formalism [4–8]. Second, in contrast with thermal equilibrium, the NESS will in general be sensitive to the specific details of the coupling between the system and the baths. For classical systems, this may be described using Nosé-Hover [20] or Langevin or Fokker-Planck equations [21,22]. These methods have been used extensively in the past to study heat flux and Fourier's law in classical chains of oscillators [23–32].

The NESS of quantum systems, on the other hand, may be modeled using techniques from open quantum systems [33–37], such as the quantum Langevin equation or the quantum master equation. One way to implement these methods is by starting with a microscopic derivation. That is, to start with a model for the system-bath interaction and then trace out the bath under suitable approximations. This approach was used, for instance, in Refs. [38–40] to study the heat flux through harmonic chains. However, in many cases

the complexity of the model may easily render such approach unfeasible.

A more straightforward method is to implement Lindblad dissipators designed only for a specific part of the system. The idea is illustrated in Fig. 1(a), which depicts a chain of spins or harmonic oscillators coupled to two reservoirs kept at different temperatures and/or chemical potentials. The baths are then modeled by dissipators chosen such they would correctly thermalize the site in which they act, provided they were uncoupled from the rest of the system. Recently, this method has been used by a number of authors to study the NESS of open quantum systems [41–54].

In this paper we wish to consider alternatively the case of a multisite bath, illustrated in Fig. 1(b). Now, the baths act on groups of particles and are such that they correctly thermalize the entire group in which they act. This idea was first considered using numerical simulations in Refs. [47,49] for the case of two-spin baths (for a different approach to this idea, see Refs. [55–57]). In this paper our goal is to implement these multisite baths in a model that is analytically tractable and allows the generalization to an arbitrary number of sites, including the thermodynamic limit. As a working model, we will consider a quantum XX spin chain or, what is equivalent, the tight-binding model for electrons hopping in a lattice. Due to the quadratic nature of this system, the multisite baths may be implemented for any chain size by coupling the Lindblad operators directly to the normal modes of the chain. This will not only produce the correct target state, but will also produce the correct thermalization rates. Moreover, it is prone to analytical investigations, for any chain size. As we will show, despite the simplicity of the model, the NESS shows a much more sophisticated structure than that of the single-site bath.

As a consequence of the exact duality between the quantum XX spin chain and the tight-binding model, all physical results have two complementary interpretations. In the case of the tight-binding model, the particle current will stand for the electric current in the system. As we will show, in this interpretation, our construction will resemble the ballistic conduction of electrons commonly studied in mesoscopic devices [5–7]. Indeed, we will show that the steady-state particle current may be written as a Landauer formula [4]. Moreover, since we have control of both temperature and chemical potential gradients,

*gtlandi@gmail.com

FIG. 1. Schematic illustration of multisite baths. Each bath is characterized by a temperature T and a chemical potential μ . (a) A chain connected to two single-site baths. (b) A chain connected to two multisite baths. (c) Multisite baths acting precisely on each half of the chain.

we are also able to study thermoelectric (Peltier-Seebeck) effects and obtain exact formulas for the Onsager coefficients.

Conversely, if our system is interpreted as a quantum XX spin chain, then the particle flux becomes the magnon flux. The situation then approaches the experiments in Ref. [14] involving the flux of magnons in engineered YIG crystals. In these experiments magnons are usually injected using a time-dependent local magnetic field generated by a microstrip antenna. These magnons are then parametrically converted due to natural four-term interaction processes inside the system. The final result, as discussed in Ref. [12], is that the microstrip antenna functions like an effective chemical potential for magnons.

II. MULTISITE LINDBLAD BATHS

A. XX chain and Lindblad dissipators

Consider a one-dimensional quantum XX chain with L sites. The Hamiltonian of the system is

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{n=1}^L \sigma_n^z - \frac{t}{2} \sum_{n=1}^{L-1} (\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y), \quad (1)$$

where the σ_n^α are the usual Pauli matrices. Here h represents the magnetic field and t represents the exchange constant between two neighboring spins. This Hamiltonian may be converted to a fermionic representation through the Jordan-Wigner transformation [58,59] by introducing a new set of operators η_n according to

$$\eta_n = \left[\prod_{j=1}^{n-1} e^{i\pi \sigma_j^+ \sigma_j^-} \right] \sigma_n^-, \quad (2)$$

where $\sigma_n^\pm = (\sigma_n^x \pm i\sigma_n^y)/2$. These operators satisfy the usual fermionic algebra

$$\{\eta_n, \eta_{n'}^\dagger\} = \delta_{n,n'}, \quad \{\eta_n, \eta_{n'}\} = 0 \quad (3)$$

and, in terms of them, Eq. (1) is converted into

$$H = -h \sum_{n=1}^L \eta_n^\dagger \eta_n - t \sum_{n=1}^{L-1} (\eta_n^\dagger \eta_{n+1} + \eta_{n+1}^\dagger \eta_n), \quad (4)$$

which is the fermionic representation of the XX chain. Equation (4) also coincides exactly with the tight-binding Hamiltonian, describing the tunneling of electrons through a lattice (typical values of t are in the order of 1 eV). In this case t represents the probability amplitude for an electron to tunnel to a neighboring site, whereas h represents the on-site energy of the electrons. The magnetization σ_n^z and the site occupation numbers $\eta_n^\dagger \eta_n$ are related by $\sigma_n^z = (2\eta_n^\dagger \eta_n - 1)$, so a fully occupied site is translated into a state fully magnetized in the $+z$ direction, whereas a fully unoccupied site represents a fully magnetized state in the $-z$ direction.

Equation (4) is diagonalized trivially by moving to Fourier space, but since we work with fixed boundary conditions, we must use a pseudomomentum orthogonal transformation matrix

$$S_{nk} = \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sin(nk), \quad k = \frac{\pi}{L+1}, \dots, \frac{L\pi}{L+1}. \quad (5)$$

The pseudomomenta k take on L distinct values in the interval $k \in [0, \pi]$. The $L \times L$ matrix S , with entries S_{nk} is both orthogonal and symmetric. We now introduce a new set of fermionic operators according to

$$\eta_k = \sum_n S_{nk} \eta_n, \quad (6)$$

where we use the indices to distinguish between the two sets of operators, with momentumlike indices such as k and q referring to the Fourier transforms of the original operators, labeled with n . In terms of these new operators the Hamiltonian (4) is put in diagonal form:

$$H = \sum_k \epsilon_k \eta_k^\dagger \eta_k, \quad \epsilon_k = -h - 2t \cos k. \quad (7)$$

Suppose now that we wish to couple the entire chain to a reservoir at a temperature T and a chemical potential μ . This can be accomplished under the context of the Lindblad master equation, by adding a dissipative term to the system's von Neumann equation, describing the time evolution of the density matrix ρ ; viz,

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -i[H, \rho] + \mathcal{D}(\rho) \quad (8)$$

(we use τ for time in order to avoid confusion with the letter t , used for the tunneling rate). The choice of the dissipator $\mathcal{D}(\rho)$ is not unique. Ideally, one should always attempt to derive it from an underlying microscopic theory describing the coupling between the system and the bath, in which case the final structure of $\mathcal{D}(\rho)$ will depend on the Hamiltonian H of the system. Of course, for models such as the one being studied here, this microscopic approach is unfeasible since we do not have any actual physical model for the bath. This problem is commonly avoided by using phenomenological dissipators (i.e., dissipators that have not been derived from a microscopic theory). Although this may give physically reasonable results, it is well known that such choices of dissipators may also lead

to physically wrong answers in certain cases. This is one of the main difficulties in using Lindblad master equations in the study of nonequilibrium phenomena.

Fortunately, for the particular Hamiltonian (7), it is possible to contemplate a general structure for the Lindblad dissipators, which correctly relaxes the chain toward the Gibbs thermal state while satisfying detailed balance. This can be done from a microscopic theory using a bath described by an infinite number of bosonic degrees of freedom, which is coupled linearly (in the η_k) to the system. Moreover, it assumes that the normal modes η_k evolve independently of each other [as they must since the Hamiltonian (7) factors into a sum of independent Hamiltonians for each mode].

The derivation of this dissipator is done the Appendix. The result is

$$D(\rho) = \sum_k 2\gamma_k \bar{n}_k \left[\eta_k^\dagger \rho \eta_k - \frac{1}{2} \{ \eta_k \eta_k^\dagger, \rho \} \right] + 2\gamma_k (1 - \bar{n}_k) \left[\eta_k \rho \eta_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \eta_k^\dagger \eta_k, \rho \} \right], \quad (9)$$

where

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/T} + 1} \quad (10)$$

is the Fermi-Dirac distribution for mode k and γ_k are positive constants. All information about the system-bath coupling, such as which particular sites are coupled to the bath, is contained within the γ_k . Since we have no information about the system-bath coupling, we will leave our results as general functions of γ_k and, eventually, we also assume for simplicity that $\gamma_k = \gamma$ for all k .

The master equation (8), with H given by Eq. (7) and $\mathcal{D}(\rho)$ given by Eq. (9), will relax the system from any initial density matrix $\rho(0)$ to the grand canonical Gibbs state $\rho(\infty) \propto e^{-(H - \mu N)/T}$. It can also be shown that this process satisfies detailed balance. That is, if we let $|i\rangle$ denote the eigenvectors of $H - \mu N$, with corresponding eigenvalues Ω_i , then the time evolution of the diagonal entries $p_i = \langle i | \rho | i \rangle$ will evolve independently of the off-diagonal entries, according to the Pauli master equation

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_j \{ W_{i,j} p_j - W_{j,i} p_i \},$$

where the transition rates $W_{i,j}$ satisfy the usual detailed balance relation

$$\frac{W_{j,i}}{W_{i,j}} = e^{-(\Omega_j - \Omega_i)/T}.$$

In fact, this relation is a direct consequence of the Kubo-Martin-Schwinger condition of the bath degrees of freedom.

It is also interesting to look at the expectation values of the correlations $\langle \eta_k^\dagger \eta_{k'} \rangle = \text{tr}(\eta_k^\dagger \eta_{k'} \rho)$. Using Eq. (8) we find

$$\frac{d}{d\tau} \langle \eta_k^\dagger \eta_k \rangle = 2\gamma_k (\bar{n}_k - \langle \eta_k^\dagger \eta_k \rangle) \quad (11)$$

$$\frac{d}{d\tau} \langle \eta_k^\dagger \eta_{k'} \rangle = -(\gamma_k + \gamma_{k'}) \langle \eta_k^\dagger \eta_{k'} \rangle, \quad k' \neq k. \quad (12)$$

Hence, all cross correlations relax to zero, whereas the occupation numbers relax to the equilibrium Fermi-Dirac occupations $\bar{n}_k$.

B. Partial coupling to the baths

We now consider the situation depicted in Fig. 1, where our XX chain of size L is coupled to two heat baths kept at different temperatures and chemical potentials. We divide the chain into three parts, which we will henceforth refer to as A, B, and C. The size of each part is L_a , L_b , and L_c , so the total size of the chain is $L = L_a + L_b + L_c$. For simplicity, we choose $L_c = L_a$. We will also be interested in the case that $L_b = 0$, which is illustrated in Fig. 1(c).

The Hamiltonian of the chain is given by Eq. (4). For bookkeeping purposes, we rename the fermionic operators η_n as follows: $\eta_n = a_n$ with $n \in [1, L_a]$, $\eta_{L_a+n} = b_n$, with $n \in [1, L_b]$ and $\eta_{L_a+L_b+n} = c_n$ with $n \in [L_a + L_b + 1, L]$. The three sets of operators a_n , b_n , and c_n still satisfy the Fermionic algebra in Eq. (3). We then divide the Hamiltonian (4) as

$$H = H_a + H_b + H_c + V_{ab} + V_{bc}, \quad (13)$$

where

$$H_\alpha = -h \sum_{n=1}^{L_\alpha} \alpha_n^\dagger \alpha_n - t \sum_{n=1}^{L_\alpha-1} (\alpha_n^\dagger \alpha_{n+1} + \alpha_{n+1}^\dagger \alpha_n). \quad (14)$$

Here and henceforth $\alpha \in \{a, b, c\}$ will serve both as a label for each chain and to denote the corresponding creation and annihilation operators.

As for the interactions between the chains, we now introduce a slight modification in the original model and write it as

$$V_{ab} = -g(a_{L_a}^\dagger b_1 + b_1^\dagger a_{L_a}) \quad (15)$$

$$V_{bc} = -g(b_{L_b}^\dagger c_1 + c_1^\dagger b_{L_b}). \quad (16)$$

That is, we use a different coupling constant g , instead of t . When $g = t$ we recover the uniform chain in Eq. (4). The assumption that $g \neq t$ means that the hopping rate inside the chains is different from the hopping rate between different chains. The reason for this choice is that, as will be shown below, when $g \ll t$, the problem is amenable to analytical calculations using perturbation theory.

We now wish to couple chains A and C to independent heat baths. To accomplish this we first diagonalize each chain individually by defining orthogonal transformation matrices exactly as in Eq. (5), but with the appropriate sizes, L_a , L_b , and L_c . To avoid confusion, we will denote the corresponding matrices by S^α , where $\alpha \in \{a, b, c\}$. Notice also that for each matrix S^α , the allowed values of k may be different [cf. Eq. (5)].

We then define new operators a_k , b_k , and c_k exactly as in Eq. (6), which diagonalize the three chains individually:

$$H_\alpha = \sum_k \epsilon_{\alpha,k} \alpha_k^\dagger \alpha_k, \quad \epsilon_{\alpha,k} = -h - 2t \cos k. \quad (17)$$

In principle we could write ϵ_k instead of $\epsilon_{\alpha,k}$, but this notation is convenient for bookkeeping. It also emphasizes the fact that the allowed values of k themselves depend on α . In momentum space, the interaction terms in Eqs. (15) and (16)

become

$$V_{ab} = -g \sum_{k,q} S_{L,a,k}^a S_{1,q}^b (a_k^\dagger b_q + b_q^\dagger a_k) \quad (18)$$

$$V_{bc} = -g \sum_{q,k} S_{L,b,q}^b S_{1,k}^c (b_q^\dagger c_k + c_k^\dagger b_q). \quad (19)$$

In order to couple chains A and C to heat reservoirs, we now write the quantum master equation for the system as

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -i[H, \rho] + D_a(\rho) + D_c(\rho), \quad (20)$$

where

$$D_\alpha(\rho) = \sum_k 2\gamma_{\alpha,k} \bar{n}_{\alpha,k} \left[\alpha_k^\dagger \rho \alpha_k - \frac{1}{2} \{ \alpha_k^\dagger \alpha_k, \rho \} \right] + 2\gamma_{\alpha,k} (1 - \bar{n}_{\alpha,k}) \left[\alpha_k \rho \alpha_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \alpha_k^\dagger \alpha_k, \rho \} \right] \quad (21)$$

and

$$\bar{n}_{\alpha,k} = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\alpha,k} - \mu_\alpha)/T_\alpha} + 1} \quad (22)$$

is the Fermi-Dirac distribution for each individual chain. For simplicity, we will usually assume that $\gamma_{\alpha,k} = \gamma$ but, again, the notation $\gamma_{\alpha,k}$ may be useful for bookkeeping purposes.

As discussed above, the individual chains, with their corresponding dissipators, will satisfy detailed balance, but when we couple them together, detailed balance is violated. An important question is, therefore, whether or not one may recover detailed balance for certain parameter ranges. Below we will show that this happens when γ is sufficiently small. From a physical standpoint we indeed expect that $\gamma \ll t$, since γ describes the rate at which particles are injected in the system, whereas the tunneling rate t describes the typical propagation times of the excitations through the chains. Moreover, as shown in Ref. [54], if $\gamma \sim t$, particle-particle interactions become important and the noninteracting model in Eq. (4) would no longer be valid. Notwithstanding, in this paper we will consider all values of γ , with the purpose of understanding exactly how it modifies the NESS and detailed balance.

C. Lyapunov equation for the covariance matrix

The quadratic nature of our model allows for the problem to be cast as a closed system of equations for the entries of the $L \times L$ covariance matrix:

$$\theta_{\alpha k, \beta q} = \langle \alpha_k^\dagger \beta_q \rangle = \text{tr}(\alpha_k^\dagger \beta_q \rho). \quad (23)$$

It is convenient to divide θ into a 3×3 block structure

$$\theta = \begin{pmatrix} \theta_A & \theta_{AB} & \theta_{AC} \\ \theta_{AB}^\dagger & \theta_B & \theta_{BC} \\ \theta_{AC}^\dagger & \theta_{BC}^\dagger & \theta_C \end{pmatrix}. \quad (24)$$

The time evolution of θ may be found directly from Eq. (20) and reads:

$$\frac{d\theta}{d\tau} = i[W, \theta] - \{\Gamma, \theta\} + 2\mathcal{D}, \quad (25)$$

where W , Γ and $\mathcal{D}$ are $L \times L$ matrices. The matrices Γ and $\mathcal{D}$ stem from the dissipative part of the dynamics and

read

$$\Gamma = \text{diag}(\gamma_{a,k}, 0, \gamma_{c,k}) \quad (26)$$

$$\mathcal{D} = \text{diag}(\gamma_{a,k} \bar{n}_{a,k}, 0, \gamma_{c,k} \bar{n}_{c,k}). \quad (27)$$

The matrix W , on the other hand, is a unitary contribution [stemming from the first term in Eq. (20)] and may be written as

$$W = W_0 - g W_1, \quad (28)$$

where

$$W_0 = \text{diag}(\epsilon_{a,k}, \epsilon_{b,k}, \epsilon_{c,k}) \quad (29)$$

and

$$W_1 = \begin{pmatrix} 0 & S_{ab} & 0 \\ S_{ab}^\dagger & 0 & S_{bc} \\ 0 & S_{bc}^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Here S_{ab} and S_{bc} are rectangular matrices with entries

$$(S_{ab})_{k,q} = S_{L,a,k}^a S_{1,q}^b, \quad \text{and} \quad (S_{bc})_{q,k} = S_{L,b,q}^b S_{1,k}^c. \quad (31)$$

We are interested in the steady-state solution of Eq. (25), which reads.

$$\{\Gamma, \theta\} - i[W, \theta] = 2\mathcal{D}. \quad (32)$$

This is a linear matrix equation for θ . It can be solved numerically by writing it as a Lyapunov equation

$$A\theta + \theta A^\dagger = 2\mathcal{D},$$

where $A = \Gamma - iW$. Efficient Lyapunov solvers are nowadays implemented in most numerical libraries. The numerical solutions were used to check the correctness of all results shown in this paper.

III. PERTURBATIVE SOLUTION

The analytical solution of Eq. (32) for arbitrary size is quite complicated. However, the problem may be treated analytically if we assume that $g \ll t$ and expand θ in a power series in g :

$$\theta = \theta_0 + g\theta_1 + g^2\theta_2 + \dots \quad (33)$$

It is convenient to define the linear matrix operator

$$\Upsilon(\theta) = \{\Gamma, \theta\} - i[W, \theta] \quad (34)$$

so that Eq. (32) may be written as

$$\Upsilon(\theta) = 2\mathcal{D} - ig[W_1, \theta]. \quad (35)$$

Inserting Eq. (33) into this formula and collecting terms of the same order in g then yields the following sequence of equations:

$$\Upsilon(\theta_0) = 2\mathcal{D} \quad (36)$$

$$\Upsilon(\theta_1) = -i[W_1, \theta_0] \quad (37)$$

$$\Upsilon(\theta_2) = -i[W_1, \theta_1], \quad (38)$$

etc. These equations may then be solved sequentially. From extensive numerical analyses of Eq. (32), we have concluded that high values of g do not lead to any new physical effects. Hence, in this paper we will restrict the discussion up to linear order in g , Eqs. (36) and (37).

Matrix equations are most easily handled using outer products, which we introduce through a vector basis $|\alpha, k\rangle$ (the use of Dirac's notation is not at all necessary, but simply convenient). All matrices appearing in Eq. (35) may now be written in terms of outer products $|\alpha, k\rangle\langle\beta, q|$. For instance, the matrices Γ , $\mathcal{D}$, and W_0 in Eqs. (26), (27), and (29) are all diagonal and read:

$$\Gamma = \sum_{\alpha, k} \gamma_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k| \quad (39)$$

$$\mathcal{D} = \sum_{\alpha, k} \gamma_{\alpha, k} \bar{n}_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k| \quad (40)$$

$$W_0 = \sum_{\alpha, k} \epsilon_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|. \quad (41)$$

We similarly decompose the covariance matrix θ in Eq. (23) by introducing two completeness relations:

$$\theta = \sum_{\alpha, k, \beta, q} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|\theta|\beta, q\rangle\langle\beta, q|. \quad (42)$$

The operator $\Upsilon(\theta)$ in Eq. (34) may now be conveniently written as

$$\begin{aligned} \Upsilon(\theta) = \sum_{\alpha, k, \beta, q} [\gamma_{\alpha, k} + \gamma_{\beta, q} - i(\epsilon_{\alpha, k} - \epsilon_{\beta, q})] \\ \times |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|\theta|\beta, q\rangle\langle\beta, q|, \end{aligned} \quad (43)$$

where $\gamma_{\alpha, k} = \gamma_{c, k} = \gamma$ and $\gamma_{b, k} = 0$.

With these results we may readily solve the zeroth-order Eq. (36). Since it represents the situation where the three chains are uncoupled, its solution will be a diagonal matrix whose entries are simply the equilibrium occupation numbers:

$$\theta_0 = \sum_{\alpha, k} \bar{n}_{\alpha, k} |\alpha, k\rangle\langle\alpha, k|, \quad (44)$$

where $\bar{n}_{\alpha, k}$ is given in Eq. (22). However, since chain B is not coupled to any reservoirs, its zeroth-order occupation numbers $\bar{n}_{b, q}$ remain undetermined from this equation. As we will show below, they can be fixed from the first order Eq. (37). (The off-diagonal elements of θ_B are zero; it is only the diagonal elements which remain undetermined.)

Next we turn to the first-order Eq. (37). In this case it is convenient to separate the cases $L_b \neq 0$ and $L_b = 0$ [cf. Fig. 1(c)]. We begin with the latter.

A. Solution when $L_b = 0$

When $L_b = 0$ all formulas of the previous subsection remain valid, provided that the indices α be restricted to $\alpha \in \{a, c\}$. Moreover, to solve Eq. (37) we need $[W_1, \theta_0]$ and the matrix W_1 in Eq. (30) needs to be modified in this case. It now becomes, in outer product notation,

$$W_1 = \sum_{k, q} S_{L_a, k}^a S_{1, q}^c |a, k\rangle\langle c, q| + \text{trans}, \quad (45)$$

where “trans” stands for transpose. Using this result together with Eq. (44), we then find that

$$-i[W_1, \theta_0] = -i \sum_{k, q} S_{L_a, k}^a S_{1, q}^c (\bar{n}_{c, q} - \bar{n}_{a, k}) |a, k\rangle\langle c, q| + \text{trans}. \quad (46)$$

Substituting this in Eq. (37) then allows us to conclude that the only nonzero entries of θ_1 will be

$$\langle a, k|\theta_1|c, q\rangle = i \frac{S_{L_a, k}^a S_{1, q}^c (\bar{n}_{a, k} - \bar{n}_{c, q})}{2\gamma - i(\epsilon_{a, k} - \epsilon_{c, q})}. \quad (47)$$

In reference to the block structure in Eq. (24), this corresponds to the elements θ_{AC} . The complete covariance matrix, up to first order, is therefore $\theta = \theta_0 + g\theta_1$, where θ_0 is given in Eq. (44) and θ_1 is given in Eq. (47).

As can be seen in Eq. (47), the result depends only on energy differences $\epsilon_{a, k} - \epsilon_{c, q}$, which are defined in Eq. (17). Hence, the constant h cancels out in the denominator and remains only in the Fermi-Dirac occupation numbers. We will therefore absorb h into the definition of the chemical potentials μ_α , which is tantamount to setting $h = 0$.

B. Solution when $L_b \neq 0$

Next we turn to the case $L_b \neq 0$, so once again $\alpha \in \{a, b, c\}$. The commutator $-i[W_1, \theta_0]$, using Eqs. (30) and (44), becomes

$$\begin{aligned} -i[W_1, \theta_0] = -i \sum_{k, q} [S_{L_a, k}^a S_{1, q}^b (\bar{n}_{b, q} - \bar{n}_{a, k}) |a, k\rangle\langle b, q| \\ + S_{L_b, q}^b S_{1, k}^c (\bar{n}_{c, k} - \bar{n}_{b, q}) |b, q\rangle\langle c, k| + \text{trans}]. \end{aligned} \quad (48)$$

Combining this with Eq. (34) then gives us the nonzero entries of θ_1 :

$$\langle a, k|\theta_1|b, q\rangle = i \frac{S_{L_a, k}^a S_{1, q}^b (\bar{n}_{a, k} - \bar{n}_{b, q})}{\gamma - i(\epsilon_{a, k} - \epsilon_{b, q})} \quad (49)$$

$$\langle b, q|\theta_1|c, k\rangle = i \frac{S_{L_b, q}^b S_{1, k}^c (\bar{n}_{b, q} - \bar{n}_{c, k})}{\gamma - i(\epsilon_{b, q} - \epsilon_{c, k})}. \quad (50)$$

Unlike Eq. (47), in this formula the denominator depends on γ and not 2γ , which is a consequence of the fact that $\gamma_{b, q} = 0$.

Equations (49) and (50) still depend on $\bar{n}_{b, q}$, which is not yet fixed. That can be accomplished by imposing a symmetry conservation based on the time evolution of $\langle b_q^\dagger b_q \rangle$. Using Eq. (20) we find that

$$\frac{d\langle b_q^\dagger b_q \rangle}{d\tau} = i\langle [V_{ab}, b_q^\dagger b_q] \rangle + i\langle [V_{bc}, b_q^\dagger b_q] \rangle$$

and, using Eqs. (18) and (19), we have

$$i\langle [V_{ab}, b_q^\dagger b_q] \rangle = 2g \sum_k S_{L_a, k}^a S_{1, q}^b \text{Im}\langle a, k|\theta|b, q\rangle \quad (51)$$

$$-i\langle [V_{bc}, b_q^\dagger b_q] \rangle = 2g \sum_k S_{L_b, q}^b S_{1, k}^c \text{Im}\langle b, q|\theta|c, k\rangle. \quad (52)$$

In the steady state $d\langle b_q^\dagger b_q \rangle / d\tau = 0$ so these two quantities should be equal; i.e.,

$$\sum_k S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \text{Im}\langle a,k|\theta|b,q \rangle = \sum_k S_{L_b,q}^b S_{1,k}^c \text{Im}\langle b,q|\theta|c,k \rangle. \quad (53)$$

The equality holds only for the sum as a whole and not for the individual elements. Inserting Eqs. (49) and (50) into this result then determines $\bar{n}_{b,q}$ uniquely.

To write down the final result we recall that from Eq. (17), $\epsilon_{c,k} = \epsilon_{a,k}$. Using also the explicit values of S^a in Eq. (5), we may then write

$$\bar{n}_{b,q} = \frac{\sum_k f(k,q)(\bar{n}_{a,k} + \bar{n}_{c,k})}{2 \sum_k f(k,q)}, \quad (54)$$

where

$$f(k,q) = \frac{\sin^2 k}{\gamma^2 + 4t^2(\cos k - \cos q)^2}. \quad (55)$$

This result is physically intuitive: $\bar{n}_{b,q}$ is given by a weighted average of the occupation numbers of chains A and C. Notice that this result makes no mention to the size of chain B, so that q may be interpreted as a continuous function varying in the interval $q \in [0, \pi]$.

An important particular case is that of $L_a = L_c = 1$, corresponding to Fig. 1(a). In this case, from Eq. (5), we find that k will take on just a single value: $k = \pi/2$. Consequently, Eq. (54) is reduced to

$$\bar{n}_{b,q} = \frac{\bar{n}_a + \bar{n}_c}{2}, \quad (56)$$

which is independent of q . This is the typical behavior expected from a ballistic system [41,43]: the occupation in the middle of the chain is the simple average of the occupation at the boundaries.

Another particular case is that when $L_b = 1$, corresponding to a single spinless quantum dot in contact with two perfectly conducting leads. If we assume that $T_a = T_c$ and that the chemical potentials are inversely polarized ($\mu_a = -\mu_c = \mu$), then it follows that $\bar{n}_b = 1/2$ for any μ .

In Fig. 2 we illustrate the possible behaviors of $\bar{n}_{b,q}$ in Eq. (54). The parameters used were $T_a = T_c = 0.05t$ and

FIG. 2. (a) The occupation numbers of chain B, $\bar{n}_{b,q}$, computed from Eq. (54) with $T_a = T_c = 0.05t$, $\mu = 0$ and $L_a = L_c = 50$. (b) Total number of excitations in chain B, $\langle N_b \rangle / L_b$, as a function of $\mu = \mu_a = \mu_c$. The different curves correspond to different values of γ/t and the solid points refer to the occupations of chains A and C.

$L_a = L_c = 50$. The size L_b does not need to be specified since q may be treated as a continuous variable in Eq. (54). Figure 2(a) shows the individual occupation numbers for $\mu_a = \mu_c = 0$ and Fig. 2(b) shows the total occupation of chain B, $\langle N_b \rangle / L_b$ [cf. Eq. (64) below], as a function of $\mu_a = \mu_c = \mu$. Different curves correspond to different values of the bath coupling γ and the solid points refer to the exact occupations of chains A or C. As can be seen in both images, when $\gamma/t \ll 1$ the behavior of chain B mimics closely the behavior of chains A and C. Conversely, when $\gamma/t \gg 1$ the normal modes are flattened out, leading to a distortion in the $\langle N_b \rangle$ vs μ curve. The size $L_a = 50$ was chosen to illustrate some of the finite size effects that appear in the problem, in this case manifested by the ripples observed in the black curve ($\gamma = 0.01$) of Fig. 2(a). These ripples disappear quickly if L_a is increased further.

In order to better understand the results of Fig. 2, it is useful to study the case where chains A and C tend to the thermodynamic limit (while L_b remains arbitrary). In this limit we may convert sums, such as Eq. (55), into integrals using the recipe $\sum_k = (L_a/\pi) \int_0^\pi dk$, which stems from the discrete values of k in Eq. (5). The ensuing integral will have a shape that will be encountered often below. It is therefore best to consider first a general integral of the form:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dk \frac{M(k)}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2}, \quad (57)$$

where $M(k)$ is an arbitrary function. This is the form of Eq. (55), with $M(k) = \sin^2 k$ and $t \rightarrow 2t$ (up to an irrelevant constant factor). It is possible to determine the behavior of this function when $\gamma/t \ll 1$ and $\gamma/t \gg 1$. In the latter, we simply neglect the second term in the denominator, which gives

$$\mathcal{M} = \frac{1}{\pi \gamma^2} \int_0^\pi dk M(k). \quad (58)$$

That is, the result becomes independent of q . Conversely, in the limit $\gamma/t \ll 1$ we see from Eq. (57) that the most important contribution to the integral will come from the region where $k \sim q$. In this case we may transform this integral into a contour problem and use the residue theorem to find that

$$\mathcal{M} = \frac{1}{\gamma t} \frac{M(q)}{\sin q}, \quad (59)$$

which is roughly the behavior of a δ function, up to a factor of $\gamma t \sin q$.

Using these results we may study the behavior of $\bar{n}_{b,q}$ in Eq. (54) in the limits of low and high γ . We find that

$$(\gamma/t \ll 1) \quad \bar{n}_{b,q} \simeq \frac{\bar{n}_{a,q} + \bar{n}_{c,q}}{2} \quad (60)$$

$$(\gamma/t \gg 1) \quad \bar{n}_{b,q} \simeq \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dk \sin^2 k \frac{(\bar{n}_{a,k} + \bar{n}_{c,k})}{2}. \quad (61)$$

We therefore see two very different physical results. When $\gamma/t \ll 1$, $\bar{n}_{b,q}$ tends to the simple arithmetic average of the occupations of the chains A and C. But when $\gamma/t \gg 1$, $\bar{n}_{b,q}$ becomes independent of q , tending to an average of all occupations numbers of chains A and C.

We may also find an exact formula for Eq. (61) in the limit $T \rightarrow 0$ [the corresponding formula for Eq. (60) is trivial]. In this case we may write $\bar{n}_{\alpha,k} = \Theta(\mu - \epsilon_{\alpha,k})$, where $\Theta(x)$ is the Heaviside function. We also define the Fermi momentum from the relation $\epsilon_{k_F} = \mu$, which gives $k_F = \arccos(-\mu/2t)$. Consequently, we find that when $\gamma/t \gg 1$,

$$\bar{n}_{b,q} = \frac{\mathcal{C}(\mu_a) + \mathcal{C}(\mu_c)}{2}, \quad (62)$$

where

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(\mu) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dk \sin^2 k \Theta(\mu - \epsilon_k) \\ &= \frac{1}{\pi} [\mu \sqrt{4t^2 - \mu^2} + \cos^{-1}(-\mu/2t)]. \end{aligned} \quad (63)$$

At $\mu = 0$ we get $\bar{n}_{b,q} = 1/2$, thence corresponding to the blue curve in Fig. 2(a). Moreover, since this result is independent of q , the total occupation $\langle \mathcal{N}_b \rangle / L_b$ is then given by the same formula. That is, Eq. (63) as a function of μ corresponds exactly to the red and blue curves in Fig. 2(b).

IV. PARTICLE CURRENT

We will now use the results from the previous section to study the steady-state particle current generated by the unbalance between the two baths. Let

$$\mathcal{N}_\alpha = \sum_k \alpha_k^\dagger \alpha_k \quad (64)$$

denote the total number of particles in chain α , and $\mathcal{N} = \mathcal{N}_a + \mathcal{N}_b + \mathcal{N}_c$ denote the total number of particles in the system. The equation for the time evolution of $\mathcal{N}$ may be obtained directly from Eq. (20). Since $[H, \mathcal{N}] = 0$, it becomes simply

$$\frac{d\langle \mathcal{N} \rangle}{d\tau} = \text{tr}[\mathcal{N}_a D_a(\rho)] + \text{tr}[\mathcal{N}_c D_c(\rho)]. \quad (65)$$

This equation shows that the reservoirs of A and C are the only two possible channels through which particles may flow into or out of the system. In the steady-state $d\langle \mathcal{N} \rangle / d\tau = 0$ and we therefore obtain

$$J := \text{tr}[\mathcal{N}_a D_a(\rho)] = -\text{tr}[\mathcal{N}_c D_c(\rho)]. \quad (66)$$

The quantity J represents the current of particles through the system. When $J > 0$ it means particles are entering the system from reservoir A. The electric current can be obtained from J by multiplying by the electric charge $-e$.

Using Eqs. (9) and (64) one may readily show that

$$J = 2\gamma \sum_k (\bar{n}_{a,k} - \langle a_k^\dagger a_k \rangle) \quad (67)$$

with a similar formula in terms of $\langle c_k^\dagger c_k \rangle$. It is also possible to obtain alternative formulas for the current, which coincide with Eq. (67) in the steady state, but may be more convenient to work with. This is important because, as seen in Eq. (44), deviations in the occupation numbers $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$ will be of order g^2 . Hence, to use Eq. (67) we would need to continue the expansion of the covariance matrix up to terms g^2 .

Instead, we may look for an alternative formula starting from the equation describing the time-evolution of $\mathcal{N}_a$, also

obtained from Eq. (20). It reads

$$\frac{d\langle \mathcal{N}_a \rangle}{d\tau} = i \langle [V_{ab}, \mathcal{N}_a] \rangle + \text{tr}[\mathcal{N}_a D_a(\rho)]. \quad (68)$$

Thus, we see that particles may flow away from chain A either to its reservoir or toward chain B (or chain C when $L_b = 0$). Comparing with Eq. (66) we see that in the steady state we should have

$$J = -i \langle [V_{ab}, \mathcal{N}_a] \rangle \quad (69)$$

and using Eqs. (18) and (64) this finally becomes

$$J = -ig \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \langle a_k^\dagger b_q - b_q^\dagger a_k \rangle. \quad (70)$$

In the steady state this formula is equivalent to Eq. (67). However, it has the advantage. but can be used together with the first-order solution for the covariance matrix (an analogous formula could be defined for chain C). When $L_b = 0$ it should be replaced by

$$J = -ig \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^c \langle a_k^\dagger c_q - c_q^\dagger a_k \rangle. \quad (71)$$

A. Current when $L_b = 0$

When $L_b = 0$ the relevant entries of the covariance matrix are given in Eq. (47). Using the specific values of $\epsilon_{\alpha,k}$ in Eq. (17) and of S^α in Eq. (5), and exploiting the symmetry of Eq. (71) with respect to k and q , we may write the particle current as

$$J = \frac{4g^2\gamma}{(L_a + 1)^2} \sum_{k,q} \frac{\sin^2 k \sin^2 q (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k})}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2}. \quad (72)$$

As expected, $J = 0$ if $g = 0$ or $\gamma = 0$. When $g = 0$ we are uncoupling the two chains and when $\gamma = 0$ we are uncoupling the chains from their respective heat reservoirs. The current is also zero if $\bar{n}_{a,k} = \bar{n}_{c,k}$, as of course expected.

It is convenient to define

$$\mathcal{I}(k) = \frac{\sin^2 k}{(L_a + 1)} \sum_q \frac{\sin^2 q}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2} \quad (73)$$

so that Eq. (72) may be written as

$$J = \frac{4g^2\gamma}{(L_a + 1)} \sum_k \mathcal{I}(k) (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k}). \quad (74)$$

This equation has the structure of Landauer's formula for the ballistic conduction of electrons through tunneling junctions [4–7]. To illustrate this we present in Fig. 3 results for the current when $\mu_a = \mu/2$ and $\mu_c = -\mu/2$, so that the potential difference (voltage bias) is μ . Here and henceforth, all currents will be given in units of $g^2\gamma/t^2$. As can be seen in the figure, the particle current shows a series of discrete jumps, as in electron tunneling experiments [5]. These jumps reflect the discreteness of the occupation numbers $\bar{n}_{\alpha,k}$ and are smoothed out as the temperature increases (illustrated in the image by the red curve).

Next we turn to the case of infinitesimal imbalances. That is, we take $\mu_a = \mu + \delta\mu/2$, $\mu_c = \mu - \delta\mu/2$, $T_a = T + \delta T/2$ and $T_c = T - \delta T/2$, where $\delta\mu$ and δT are assumed to be

FIG. 3. The particle current J (in units of $g^2\gamma/t^2$) as a function of the chemical potential difference (voltage bias) μ computed using Eq. (72) with $L_a = 40$ and $\gamma/t = 1$. The black curve corresponds to $T_a = T_c = 0$ and the red curve to $T_a = T_c = 0.02t$.

infinitesimal. In this case we may expand $\bar{n}_{a,k}$ and $\bar{n}_{c,k}$ in a power series. As a result, Eq. (72) may be written as

$$J = \delta\mu \frac{\partial F}{\partial \mu} + \delta T \frac{\partial F}{\partial T}, \quad (75)$$

where

$$F = \frac{4g^2\gamma}{(L_a + 1)} \sum_k \mathcal{I}(k) \bar{n}_k. \quad (76)$$

We therefore see that F plays the role of a nonequilibrium free energy, from which the different contributions to J may be obtained by differentiation.

Examples of the currents $\partial F/\partial \mu$ and $\partial F/\partial T$ are shown in Figs. 4 and 5 as a function of the chemical potential μ , for $\gamma/t = 1$ and $T/t = 0.02$. The different images correspond to different sizes L_a and the superimposed red-dashed curve corresponds to the thermodynamic limit [Eq. (78) below]. The curves show the strong presence of finite-size effects, which manifest themselves as sharp peaks occurring when $\mu = -2t \cos k$ [recall the discrete structure of k in Eq. (5)]. As the size increases, these strong oscillations give place to a smooth curve, which gives a nonzero current only around the interval $\mu \in [-2t, 2t]$, corresponding to the bandwidth of ϵ_k . It is also worth mentioning that these finite-size oscillations are characteristic of low temperatures. If $T/t \sim 1$ they are replaced by smooth curves.

B. Thermodynamic limit

In the thermodynamic limit Eq. (73) becomes

$$\mathcal{I}(k) = \frac{\sin^2 k}{\pi} \int_0^\pi \frac{\sin^2 q \, dq}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2}. \quad (77)$$

Similarly, Eqs. (72) and (76) are transformed to

$$J = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi \mathcal{I}(k)(\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k})dk \quad (78)$$

and

$$F = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi \mathcal{I}(k) \bar{n}_k dk. \quad (79)$$

FIG. 4. The particle current due to a gradient in the chemical potential, $(\partial F/\partial \mu)$ vs μ plotted using Eq. (76) with $\gamma/t = 1$ and $T = 0.02t$. Each curve correspond to a different value of $L_a = L_c$, respectively: (a) 1, (b) 4, (c) 10, (d) 20, (e) 50, (f) 80, (g) 120, and (h) 160. The red dashed lines correspond to the thermodynamic limit, Eq. (78).

These equations were used to plot the red curves in Figs. 4 and 5.

The integral in Eq. (77) falls under the category of Eq. (57). Hence the corresponding low- and high- γ behaviors may be read off directly from Eqs. (58) and (59):

$$\mathcal{I}(k) = \begin{cases} \frac{|\sin k|^3}{\gamma^t}, & \text{if } \gamma \ll t \\ \frac{\sin^2 k}{2\gamma^2}, & \text{if } \gamma \gg t \end{cases}. \quad (80)$$

FIG. 5. The particle current due to a temperature gradient, $(\partial F/\partial T)$ vs μ plotted using Eq. (76) with $\gamma/t = 1$ and $T = 0.02t$. Each curve correspond to a different value of $L_a = L_c$, respectively: (a) 1, (b) 4, (c) 10, (d) 20, (e) 50, (f) 80, (g) 120, and (h) 160. The red dashed lines correspond to the thermodynamic limit, Eq. (78).

For completeness, we also mention that for intermediate values of γ , this integral may be computed analytically and reads

$$\mathcal{I}(k) = \frac{\sin^2 k}{t^2} \left\{ \frac{[\lambda_1 + (\lambda_1^2 + \lambda_2^2)^{1/2}]^{1/2}}{\gamma\sqrt{2}} - 1 \right\}, \quad (81)$$

where $\lambda_1 = \gamma^2 + t^2 \sin^2 k$ and $\lambda_2 = 2\gamma t \cos k$. The dependence of γ on the particle current is investigated in Fig. 6 for both an imbalance in the chemical potential and an imbalance in the temperature. We will now discuss how to obtain the analytical forms of these functions in the case that $T \rightarrow 0$.

At zero temperature we may again use that $\bar{n}_k = \Theta(\mu - \epsilon_k)$, which implies that $\partial \bar{n}_k / \partial \mu = \delta(\mu - \epsilon_k)$. Recalling also the definition of the Fermi momentum as $k_F = \arccos(-\mu/2t)$,

FIG. 6. Influence of the coupling constant γ in the particle current, at zero temperature and at the thermodynamic limit. (a) $(\partial F/\partial \mu)$ vs μ and (b) $(\partial F/\partial T)/T$ vs μ . The curves were computed using Eqs. (82) and (84).

we find for Eq. (79) the following simple result:

$$\frac{\partial F}{\partial \mu} = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \frac{\mathcal{I}(k_F(\mu))}{2t \sin k_F(\mu)}, \quad (82)$$

where the factor in the denominator comes from transforming $\delta(\mu - \epsilon_k)$ into $\delta(k - k_F)$. Using the approximate results in Eq. (80) we then obtain the explicit forms, valid for $\mu \in [-2t, 2t]$:

$$\frac{\partial F}{\partial \mu} = \begin{cases} \frac{g^2}{2\pi t^4} (4t^2 - \mu^2), & \gamma/t \ll 1 \\ \frac{g^2}{2\pi t^2 \gamma} \sqrt{4t^2 - \mu^2} & \gamma/t \gg 1 \end{cases}, \quad (83)$$

which match well the black ($\gamma/t = 0.001$) and green ($\gamma/t = 10$) curves plotted in Fig. 6(a).

Similarly, we may analyze the behavior of $\partial F/\partial T$ as $T \rightarrow 0$. Of course, if $T = 0$ there can be no temperature imbalance, so we must look for the lowest contribution in T . To do that we perform a Sommerfeld expansion [2,60] by writing the integral in Eq. (79) as

$$\begin{aligned} \int_0^k \mathcal{I}(k) \bar{n}_k dk &= \int_{-2t}^{2t} \frac{\mathcal{I}(k(\epsilon))}{d\epsilon/dk} \frac{d\epsilon}{e^{(\epsilon-\mu)/T} + 1} \\ &= O(T^0) + \frac{\pi^2}{6} T^2 \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left[\frac{\mathcal{I}(k(\epsilon))}{d\epsilon/dk} \right]_{\epsilon=\mu}, \end{aligned}$$

where the first term is independent of temperature. Consequently, we find that $\partial F/\partial T$ may be written as

$$\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{4\pi T g^2 \gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \mu} \left[\frac{\mathcal{I}(k_F(\mu))}{2t \sin k_F(\mu)} \right]. \quad (84)$$

Using Eq. (80) for the low- and high- γ behavior of $\mathcal{I}$, we finally conclude that

$$\frac{\partial F}{\partial T} = \begin{cases} -\frac{\pi g^2 T \mu}{3t^4}, & \gamma/t \ll 1 \\ -\frac{\pi g^2 T \mu}{6t^2 \gamma \sqrt{4t^2 - \mu^2}} & \gamma/t \gg 1 \end{cases}, \quad (85)$$

which, again, hold only for $\mu \in [-2t, 2t]$. These two formulas match precisely the black ($\gamma/t = 0.001$) and green ($\gamma/t = 10$) curves plotted in Fig. 6(b). This shows that when $\gamma/t \ll 1$ the current due to a temperature gradient is linear in μ , but when $\gamma/t \gg 1$, it acquires sharp peaks near the band edges.

C. Current when $L_b \neq 0$

We now turn to the particle current when the size of chain B is nonzero. The definition of J in this case is given in Eq. (70), with the relevant matrix elements given in Eq. (49). The current then comes

$$J = \frac{8g^2\gamma}{(L_a+1)(L_b+1)} \sum_{k,q} \frac{\sin^2 k \sin^2 q (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{b,q})}{\gamma^2 + 4t^2(\cos k - \cos q)^2}, \quad (86)$$

where, recall, the allowed values of k and q are different since L_a and L_b are arbitrary. This equation also depends on the occupation numbers $\bar{n}_{b,q}$, which are given in Eq. (54).

When $L_a = L_c = 1$ Eq. (86) reduces to

$$J = \frac{4g^2\gamma}{(L_b+1)} (\bar{n}_a - \bar{n}_c) \sum_q \frac{\sin^2 q}{\gamma^2 + 4t^2 \cos^2 q}, \quad (87)$$

which is simply a constant coefficient multiplied by the occupation difference $(\bar{n}_a - \bar{n}_c)$. A homogeneous ($g = t$) XX spin chain under a single spin bath was studied in Ref. [43], which found for the current the exact formula

$$J = \frac{\gamma}{t^2 + \gamma^2} \frac{\bar{n}_a - \bar{n}_c}{2}. \quad (88)$$

The difference between this result and Eq. (87) is due to the fact that we assumed a nonhomogeneous chain ($g \neq t$). If we take $g = t$ and if we continue the series expansion of θ up to higher orders, we recover exactly Eq. (88), as easily verified from numerical simulations.

Examples of Eq. (86) are shown in Fig. 7 for $\gamma/t = 10$ and $\gamma/t = 1$, with different choices of L_a and L_b . When $\gamma/t \gg 1$, as shown in Eq. (61), the occupation numbers $\bar{n}_{b,q}$ become independent of q . Consequently, in this case the current J in

FIG. 7. Particle current $J/\delta\mu$ vs μ for different sizes of the middle chain [see legend in (b)], computed using Eq. (86) with $T = 0.02t$ for different combinations of L_a and γ/t : (a) $L_a = 50$, $\gamma/t = 10$, (b) $L_a = 100$, $\gamma/t = 10$, (c) $L_a = 50$, $\gamma/t = 1$, and (d) $L_a = 100$, $\gamma/t = 1$. The dashed black curve corresponds to Eq. (82).

Eq. (86) becomes independent of the size L_b of chain B. This is visible in Figs. 7(a) and 7(b), which correspond to $\gamma/t = 10$, where we see that the curves for different values of L_b practically coincide. Moreover, we also see that these curves mimic the behavior of the current when $L_b = 0$, represented here by the dashed black curves plotted from Eq. (82). Thus, we conclude that when $\gamma/t \gg 1$, the presence of chain B does not affect in any way the current through the system. When $\gamma/t = 1$ [Figs. 7(c) and 7(d)], on the other hand, a dependence in L_b becomes visible. However, even though the changes are substantial when moving from $L_b = 1$ to $L_b = 2$, the curves for $L_b = 4$ and $L_b = 10$ already practically coincide. Notwithstanding, none of the curves coincide with that from $L_b = 0$, thus showing that when $\gamma/t = 1$, the presence of chain B does have an effect on the properties of the current.

The behavior of Eq. (86) when $\gamma/t \ll 1$, on the other hand, is much more intricate since it will depend sensibly on the sizes L_a and L_b . The reason for this is that the flux will have substantial contributions whenever $(\cos k - \cos q) \sim 0$. But k and q take on a mesh of discrete values, as denoted in Eq. (5) (with L_a and L_b , respectively). Consequently, the behavior of J will change substantially for different combinations of L_a and L_b .

Instead, let us suppose for simplicity that chains A and C tend to the thermodynamic limit, whereas the size of chain B remains arbitrary. In this case we may convert the sum over k in Eq. (86) to an integral, to find

$$J = \frac{8g^2\gamma}{\pi(L_b+1)} \sum_q \int_0^\pi dk \frac{\sin^2 k \sin^2 q (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{b,q})}{\gamma^2 + 4t^2(\cos k - \cos q)^2}. \quad (89)$$

Next we may use Eq. (59) to approximate the result for $\gamma/t \ll 1$. Using also Eq. (60) we then find that

$$J \simeq \frac{2g^2\gamma}{L_b+1} \sum_q \sin^3 q (\bar{n}_{a,q} - \bar{n}_{c,q}). \quad (90)$$

Comparing this with Eq. (72), and noticing also Eq. (80), we conclude that when $\gamma/t \ll 1$ the flux through chain B will behave somewhat like the flux for $L_b = 0$ studied in Sec. IV B. However, it will be governed by L_b , instead of L_a . This idea is illustrated in Fig. 8, where we plot Eq. (89) for $L_b = 10$ and

FIG. 8. $J/\delta\mu$ vs μ for different values of γ/t , with $L_b = 10$ and $T/t = 0.02$. When $\gamma/t \ll 1$, the curve approaches Fig. 4(c).

several values of γ/t . As can be seen, when γ/t decreases the current approaches the behavior of Fig. 4(c), which was computed with $L_b = 0$, and $L_a = L_c = 10$.

V. HEAT CURRENT AND ONSAGER COEFFICIENTS

We now discuss the energy and heat currents through the system, and also compute the Onsager coefficients for this problem. To find a formula for the energy current we may repeat the procedure that led us to Eq. (70), but with the Hamiltonian H instead of $\mathcal{N}$. Starting with Eq. (20) we find the following equation for the time evolution of $\langle H \rangle$:

$$\frac{d\langle H \rangle}{dt} = \text{tr}[H D_a(\rho)] + \text{tr}[H D_c(\rho)]. \quad (91)$$

Thus, the flux of energy in the steady state will be

$$J_E = \text{tr}[H D_a(\rho)] = \text{tr}[H_a D_a(\rho)] + \text{tr}[V_{ab} D_a(\rho)], \quad (92)$$

where

$$\begin{aligned} \text{tr}[H_a D_a(\rho)] &= 2\gamma \sum_k \epsilon_{a,k} (\bar{n}_{a,k} - \langle a_k^\dagger a_k \rangle) \\ \text{tr}[V_{ab} D_a(\rho)] &= g\gamma \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b [\langle a_k^\dagger b_q \rangle + \langle b_q^\dagger a_k \rangle]. \end{aligned}$$

The first equation requires knowledge of the second-order expansion of Eq. (33). A formula based on the first-order solution may be found by looking at the time evolution of $\langle H_a \rangle$, again obtained from Eq. (20):

$$\frac{d\langle H_a \rangle}{dt} = i\langle [V_{ab}, H_a] \rangle + \text{tr}[H_a D_a(\rho)]. \quad (93)$$

Thus, we see that

$$\begin{aligned} \text{tr}[H_a D_a(\rho)] &= -i\langle [V_{ab}, H_a] \rangle \\ &= -ig \sum_{k,q} \epsilon_{a,k} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b \langle a_k^\dagger b_q - b_q^\dagger a_k \rangle. \end{aligned}$$

Combining the results we conclude that the energy flux in Eq. (92) may therefore be written as

$$J_E = g \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^b [\langle a_k^\dagger b_q \rangle (\gamma - i\epsilon_{a,k}) + \langle b_q^\dagger a_k \rangle (\gamma + i\epsilon_{a,k})].$$

If $L_b = 0$, we should write instead

$$J_E = g \sum_{k,q} S_{L_a,k}^a S_{1,q}^c [\langle a_k^\dagger c_q \rangle (\gamma - i\epsilon_{a,k}) + \langle c_q^\dagger a_k \rangle (\gamma + i\epsilon_{a,k})]. \quad (94)$$

A. Energy current when $L_b = 0$

For simplicity, we will restrict the discussion of the energy current to the case $L_b = 0$. In this case, similarly to Eq. (72), we obtain for the energy current (94) the following result:

$$J_E = \frac{4g^2\gamma}{(L_a+1)^2} \sum_{k,q} \frac{\sin^2 k \sin^2 q (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k})(\epsilon_k + \epsilon_q)/2}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2}. \quad (95)$$

It is also convenient to define

$$\mathcal{I}_E(k) = \frac{\sin^2 k}{L_a+1} \sum_q \frac{\sin^2 q (\epsilon_k + \epsilon_q)/2}{\gamma^2 + t^2(\cos k - \cos q)^2} \quad (96)$$

so that Eq. (95) becomes

$$J_E = \frac{4g^2\gamma}{L_a+1} \sum_k \mathcal{I}_E(k) (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k}). \quad (97)$$

In the case of infinitesimal imbalances the energy current becomes

$$J_E = \delta\mu \frac{\partial G}{\partial \mu} + \delta T \frac{\partial G}{\partial T}, \quad (98)$$

where

$$G = \frac{4g^2\gamma}{L_a+1} \sum_k \mathcal{I}_E(k) \bar{n}_k. \quad (99)$$

Examples of $\partial G/\partial \mu$ and $\partial G/\partial T$ are shown in Figs. 9 and 10 for conditions similar to those used in Figs. 4 and 5. As can be seen, the role of finite-size effects is similar to the previous case.

In the thermodynamic limit we may convert $\mathcal{I}_E(k)$ in Eq. (96) into an integral and then use Eq. (57) to explore the limits where $\gamma/t \ll 1$ and $\gamma/t \gg 1$. We then get

$$\mathcal{I}_E(k) \simeq \begin{cases} \frac{\epsilon_k |\sin k|^3}{\gamma t} = \epsilon_k \mathcal{I}(k), & \text{if } \gamma \ll t \\ \frac{\epsilon_k \sin^2 k}{4\gamma^2} = \frac{\epsilon_k \mathcal{I}(k)}{2}, & \text{if } \gamma \gg t \end{cases}. \quad (100)$$

The presence of the factor of 1/2 in the second equation has, as we will show below, important consequences to the behavior of the system. For intermediate values of γ/t , the integral may also be computed analytically but the result is cumbersome and will not be presented.

Using these results we find that the flux in Eq. (97) may be written as

$$J_E \simeq \begin{cases} \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi dk \mathcal{I}(k) \epsilon_k (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k}), & \text{if } \gamma \ll t \\ \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi dk \frac{\mathcal{I}(k)}{2} \epsilon_k (\bar{n}_{a,k} - \bar{n}_{c,k}), & \text{if } \gamma \gg t \end{cases}, \quad (101)$$

which may be compared directly with Eq. (78). Similarly, Eq. (99) becomes

$$G \simeq \begin{cases} \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi dk \mathcal{I}(k) \epsilon_k \bar{n}_k, & \text{if } \gamma \ll t \\ \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi dk \frac{\mathcal{I}(k)}{2} \epsilon_k \bar{n}_k, & \text{if } \gamma \gg t \end{cases}, \quad (102)$$

which may be compared with Eq. (79).

At zero temperatures, Eqs. (82) and (84) remain valid for the energy current, provided we replace $\mathcal{I}$ with $\mathcal{I}_E$. We therefore find that

$$\frac{\partial G}{\partial \mu} = \begin{cases} \frac{g^2\mu(4t^2-\mu^2)}{2\pi t^4}, & \gamma/t \ll 1 \\ \frac{g^2\mu\sqrt{4t^2-\mu^2}}{4\pi t^2\gamma}, & \gamma/t \gg 1 \end{cases} \quad (103)$$

and

$$\frac{\partial G}{\partial T} = \begin{cases} \frac{\pi g^2 T (4t^2-3\mu^2)}{6t^4}, & \gamma/t \ll 1 \\ \frac{\pi g^2 T}{6\gamma t^2} \frac{(2t^2-\mu^2)}{\sqrt{4t^2-\mu^2}}, & \gamma/t \gg 1 \end{cases}. \quad (104)$$

These results, together with the general dependence when $T = 0$, are shown in Fig. 11.

FIG. 9. The energy current due to a gradient in the chemical potential, $(\partial G/\partial\mu)$ vs μ plotted using Eq. (99) with $\gamma/t = 1$ and $T = 0.02t$. Each curve correspond to a different value of $L_a = L_c$, respectively: (a) 2, (b) 4, (c) 10, (d) 20, (e) 50, (f) 80, (g) 120, and (h) 160. The red dashed lines correspond to the thermodynamic limit.

B. Onsager coefficients

From the first law of thermodynamics, the current of energy should have a term due to the current of heat and another due to the current of particles. That is, we should have $J_E = J_Q + \mu J$, where J_Q is the heat current through the system. Since we know J and J_E , we may then use this to compute the heat current:

$$J_Q = J_E - \mu J. \quad (105)$$

The currents J and J_Q may be cast in the language of Onsager's coefficients [61] by defining the imbalances as $(\delta\mu)/T$ and $-\delta(1/T)$. Then the fluxes J and J_Q should satisfy

$$\begin{pmatrix} J \\ J_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_{11} & \ell_{12} \\ \ell_{21} & \ell_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\delta\mu)/T \\ -\delta(1/T) \end{pmatrix}, \quad (106)$$

FIG. 10. The energy current due to a temperature gradient, $(\partial G/\partial T)$ vs μ plotted using Eq. (99) with $\gamma/t = 1$ and $T = 0.02t$. Each curve correspond to a different value of $L_a = L_c$, respectively: (a) 2, (b) 4, (c) 10, (d) 20, (e) 50, (f) 80, (g) 120, and (h) 160. The red dashed lines correspond to the thermodynamic limit.

FIG. 11. (a) $\partial G/\partial\mu$ vs μ and (b) $(\partial G/\partial T)/T$ vs μ for $T = 0$ in the thermodynamic limit.

FIG. 12. Onsager coefficients computed from Eqs. (108) and (110), in the thermodynamic limit, with $T = 0.02t$ and different values of γ/t , as shown in (b).

where the ℓ_{ij} are the Onsager coefficients. According to Onsager's reciprocity relations [61], we expect that $\ell_{12} = \ell_{21}$. Moreover, the entropy production rate in the NESS is defined as

$$\Pi = J(\delta\mu)/T - J_Q\delta(1/T) \quad (107)$$

and it should be a non-negative quantity. This will be satisfied for any infinitesimal unbalance provided the determinant of the Onsager matrix, $\ell_{11}\ell_{22} - \ell_{12}\ell_{21}$, is non-negative.

We now use all our previous results to obtain the Onsager coefficients. Using Eq. (75) we find that

$$\ell_{11} = T \frac{\partial F}{\partial \mu}, \quad \ell_{12} = T^2 \frac{\partial F}{\partial T}. \quad (108)$$

Similarly, using Eqs. (75) and (98) we may write

$$J_Q = \delta_\mu \left[\frac{\partial G}{\partial \mu} - \mu \frac{\partial F}{\partial \mu} \right] + \delta T \left[\frac{\partial G}{\partial T} - \mu \frac{\partial F}{\partial T} \right]. \quad (109)$$

Thus, the other Onsager coefficients are

$$\ell_{21} = T \left[\frac{\partial G}{\partial \mu} - \mu \frac{\partial F}{\partial \mu} \right], \quad \ell_{22} = T^2 \left[\frac{\partial G}{\partial T} - \mu \frac{\partial F}{\partial T} \right]. \quad (110)$$

Examples of the Onsager coefficients, computed in the thermodynamic limit, are shown in Fig. 12 for different values of γ . As can be seen, the direct coefficients ℓ_{11} and ℓ_{22} are always positive, as expected. The corresponding determinant is also always positive, thus ensuring a positive entropy production. However, the cross coefficients ℓ_{12} and ℓ_{21} only coincide for small values of γ . This is illustrated specifically in Fig. 13, where we compare ℓ_{12} and ℓ_{21} for $\gamma/t = 0.0001$ and $\gamma/t = 0.001$. As can be seen, only for the smallest value of γ/t does the two quantities coincide.

FIG. 13. Comparison between the cross-Onsager coefficients ℓ_{12} and ℓ_{21} for $\gamma/t = 0.0001$ and 0.001 , with $T = 0.02t$.

This fact can actually be demonstrated analytically, using Eqs. (79) and (102). The coefficient ℓ_{12} in Eq. (108) reads

$$\ell_{12} = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi dk \mathcal{I}(k) T^2 \frac{\partial \bar{n}}{\partial T}, \quad (111)$$

which holds for any value of γ . However, for the coefficient ℓ_{21} in Eq. (110) we must distinguish between the different γ regimes. From Eq. (102), if $\gamma/t \ll 1$, then we will have

$$\ell_{21} = \frac{4g^2\gamma}{\pi} \int_0^\pi dk \mathcal{I}(k) T(\epsilon_k - \mu) \frac{\partial \bar{n}}{\partial \mu}. \quad (112)$$

Since [cf. Eq. (10)]

$$\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial T} = \frac{\epsilon_k - \mu}{T} \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial \mu}$$

we conclude that when $\gamma/t \ll 1$, $\ell_{12} = \ell_{21}$. Conversely, in the case when $\gamma/t \gg 1$, no such equality holds due to the factor of $1/2$ in the second line of Eq. (102). This therefore explains the results in Fig. 13.

The reciprocity relation $\ell_{12} = \ell_{21}$ is a direct consequence of detailed balance in the system [61]. These results therefore indicate that in our multisite setup, the system should only satisfy detailed balance when $\gamma/t \ll 1$. This is further corroborated by the results in Fig. 2, where we found that only for low γ/t did chain B correctly thermalize locally, something expected from a system satisfying detailed balance.

VI. CONCLUSIONS

The nonequilibrium properties of open quantum chains is known to be extremely sensitive to the type of dissipator employed. In addition, unless one has detailed experimental knowledge of the system-bath coupling, the structure of the dissipator is not unique. Hence the importance of understanding the properties of the NESS under the influence of different dissipators. In this paper we have discussed in detail the properties of multisite baths, where the Lindblad dissipator acts on groups of spins and is such that the entire group, if isolated, is correctly thermalized. For our system, which is quadratic (in the language of second quantization), this type of dissipator is readily constructed by coupling to the normal modes of the Hamiltonian. Indeed, it is worth mentioning that this approach can be used for any quadratic Hamiltonian, fermionic or bosonic. Hence, together with the perturbative solution presented here, this multisite bath structure opens

avenues to the research of many other systems in statistical mechanics and condensed matter in general.

We have shown that the multisite baths introduce physical properties, which are substantially richer from those of a single-site bath. Using a perturbative method we have shown that the particle and energy currents have the structure of Landauer's formula, and we have been able to find analytical formulas for the Onsager coefficients. In all results, we have observed a sensitive dependence on the coupling constant γ . When $\gamma/t \ll 1$, which is the situation expected experimentally, the system obeys the Onsager reciprocal relations and the middle chain correctly thermalizes to its Fermi-Dirac distribution. Conversely, when $\gamma/t \gg 1$ we find that all modes tend to contribute equally, leading to substantial modifications in the properties of the system.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank Prof. Dragi Karevski for fruitful discussions. For their financial support, the authors would like to acknowledge the Brazilian funding agencies CNPq and FAPESP (2014/01218-2).

APPENDIX: MICROSCOPIC DERIVATION OF THE LINDBLAD DISSIPATOR

In this Appendix we will show how to derive the dissipator (9). The basic idea will be to assume that, since the Hamiltonian (7) factors into a sum of commuting terms for each normal mode, we may treat each mode individually. We therefore only need to consider a Hamiltonian $H = \epsilon \eta^\dagger \eta$ for one normal mode [here η is a simplified notation for each of the η_k defined in Eq. (6) and not the original η_n of Eq. (2)]. The total dissipator will then be a sum of the dissipators of each mode.

We will further assume that this normal mode is coupled to an infinite number of bosonic degrees of freedom with Hamiltonian $H_B = \sum_\ell \Omega_\ell b_\ell^\dagger b_\ell$, where b_ℓ are bosonic operators satisfying $[b_\ell, b_{\ell'}^\dagger] = \delta_{\ell, \ell'}$. The interaction Hamiltonian is assumed to

$$H_I = \sum_\ell f_\ell (\eta + \eta^\dagger) (b_\ell + b_\ell^\dagger), \quad (\text{A1})$$

where f_ℓ are certain coupling constants. The only assumption here is that the bath couples linearly in the η (or, more precisely, in the η_k). Notice that since the normal modes η_k are linearly related to the original operators η_n [cf. Eq. (4)], it does not matter if the bath is coupled to the normal modes η_k or to the η_n . This will only change the constants f_ℓ .

Under the assumption of weak coupling and in the rotating wave approximation we may trace out the bath and write a corresponding Lindblad dissipator. This is most readily done using the method of eigenoperators, which is discussed in detail in Ref. [35]. An arbitrary operator $O(\omega)$ is termed an eigenoperator of H when

$$[H, O(\omega)] = -\omega O(\omega)$$

for some given frequency ω . According to the derivation in Ref. [35], we must construct the eigenoperator associated to $O = (\eta + \eta^\dagger)$, which is the operator coupling to the bath. Due to the diagonal structure of $H = \epsilon \eta^\dagger \eta$, it follows that this

eigenoperator will be

$$O(\omega) = \eta \delta_{\omega, \epsilon} + \eta^\dagger \delta_{\omega, -\epsilon}. \quad (\text{A2})$$

Intuitively speaking, the coupling $(\eta + \eta^\dagger)$ to the bath induces transitions in the system and ω represents the allowed energy transitions due to this coupling. For our case the only allowed transitions have energy differences ϵ and $-\epsilon$.

In terms of the eigenoperators $O(\omega)$, the Lindblad dissipator corresponding to the bath coupling (A1) will be [35]:

$$D(\rho) = \sum_\omega \Gamma(\omega) \left[O(\omega) \rho O^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ O^\dagger(\omega) O(\omega), \rho \} \right], \quad (\text{A3})$$

where

$$\Gamma(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \text{tr} \left\{ (e^{iH_B t} B e^{-iH_B t}) B \frac{e^{-H_B/T}}{\text{tr}(e^{-H_B/T})} \right\}$$

is the Fourier transform of bath correlation functions, with $B = \sum_\ell f_\ell (b_\ell + b_\ell^\dagger)$ [see Eq. (A1)]. Substituting Eq. (A2) into Eq. (A3) we get

$$D(\rho) = \Gamma(\epsilon) \left[\eta \rho \eta^\dagger - \frac{1}{2} \{ \eta^\dagger \eta, \rho \} \right] + \Gamma(-\epsilon) \left[\eta^\dagger \rho \eta - \frac{1}{2} \{ \eta \eta^\dagger, \rho \} \right]. \quad (\text{A4})$$

The quantities $\Gamma(\omega)$ may be resolved further by computing the Fourier transform and using the integral representation of the δ function. As a result we get

$$\Gamma(\omega) = 2\pi \sum_\ell f_\ell^2 [\delta(\omega - \Omega_\ell) [1 + \bar{n}_B(\Omega_\ell)] + \delta(\omega + \Omega_\ell) \bar{n}_B(\Omega_\ell)],$$

where $\bar{n}_B(x) = 1/(e^{x/T} - 1)$ is the Bose-Einstein occupation number for the bath frequencies. Next we assume that the bath frequencies Ω_ℓ cover a continuum of values (as expected from photonic or phononic baths) so that we may convert the ℓ sum into an integral over Ω . We define the spectral density

$$\gamma(\Omega) = \sum_\ell 2\pi f_\ell^2 \delta(\Omega - \Omega_\ell)$$

in terms of which we may write

$$\Gamma(\omega) = \int_0^\infty d\Omega \gamma(\Omega) [\delta(\omega - \Omega) [1 + \bar{n}_B(\Omega)] + \delta(\omega + \Omega) \bar{n}_B(\Omega)].$$

This can be further simplified to

$$\Gamma(\omega) = \begin{cases} \gamma(\omega) [1 + \bar{n}_B(\omega)], & \text{if } \omega > 0 \\ \gamma(-\omega) \bar{n}_B(-\omega), & \text{if } \omega < 0 \end{cases}. \quad (\text{A5})$$

The appearance of the Bose-Einstein occupation numbers in a fermionic problem may at first seem strange. But that is indeed correct, since they appear due to the effect of the bath, which is bosonic. Notwithstanding, the Fermi-Dirac occupation numbers $\bar{n}_F(x) = 1/(e^{x/T} + 1)$ may be introduced naturally as follows.

From Eq. (A4), we must now compute $\Gamma(\pm\epsilon)$. In doing so we must differentiate between $\epsilon > 0$ and $\epsilon < 0$. Suppose first

that $\epsilon > 0$. Then we use the identities

$$\frac{\bar{n}_B(\epsilon)}{2\bar{n}_B(\epsilon) + 1} = \bar{n}_F(\epsilon), \quad \frac{1 + \bar{n}_B(\epsilon)}{2\bar{n}_B(\epsilon) + 1} = 1 - \bar{n}_F(\epsilon) \quad (\text{A6})$$

to write Eq. (A5) as

$$\begin{aligned} \Gamma(\epsilon) &= \gamma(\epsilon)[2\bar{n}_B(\epsilon) + 1][1 - \bar{n}_F(\epsilon)] \\ \Gamma(-\epsilon) &= \gamma(\epsilon)[2\bar{n}_B(\epsilon) + 1]\bar{n}_F(\epsilon). \end{aligned}$$

To simplify the problem we will restrict the discussion to the case where $2\bar{n}_B(\epsilon) + 1 = \coth(\epsilon/2T) \simeq 1$. This will generally be true for Fermionic systems. The relevant energies here are $\epsilon_k = -h - 2t \cos k$ [Eq. (7)] so this approximation will in general be reasonable, except for those momentum values where $\epsilon_k \sim 0$. Notwithstanding, with simplicity in mind, we will continue to assume this to hold. As a result, we get

$$\Gamma(\epsilon) = \gamma(\epsilon)[1 - \bar{n}_F(\epsilon)], \quad \Gamma(-\epsilon) = \gamma(\epsilon)\bar{n}_F(\epsilon).$$

Hence, Eq. (A4) finally becomes

$$\begin{aligned} D(\rho) &= \gamma(\epsilon)[1 - \bar{n}_F(\epsilon)][\eta\rho\eta^\dagger - \tfrac{1}{2}\{\eta^\dagger\eta, \rho\}] \\ &\quad + \gamma(\epsilon)\bar{n}_F(\epsilon)[\eta^\dagger\rho\eta - \tfrac{1}{2}\{\eta\eta^\dagger, \rho\}]. \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

This dissipator has precisely the structure of each of the terms in Eq. (9).

Next we consider the case $\epsilon < 0$. In this case we use the identity $\bar{n}_B(-x) = -[1 + \bar{n}_B(x)]$ to write Eq. (A5)

as

$$\begin{aligned} \Gamma(\epsilon) &= \gamma(-\epsilon)\bar{n}_B(-\epsilon) = -\gamma(-\epsilon)[1 + \bar{n}_B(\epsilon)] \\ \Gamma(-\epsilon) &= \gamma(-\epsilon)[1 + \bar{n}_B(-\epsilon)] = -\gamma(-\epsilon)\bar{n}_B(\epsilon). \end{aligned}$$

Next we use Eq. (A6) once again but, this time, we note that since $\epsilon < 0$, $\coth(\epsilon/2T) \simeq -1$. Consequently, we will get

$$\begin{aligned} \Gamma(\epsilon) &\simeq \gamma(-\epsilon)[1 - \bar{n}_F(\epsilon)] \\ \Gamma(-\epsilon) &\simeq \gamma(-\epsilon)\bar{n}_F(\epsilon). \end{aligned}$$

As a result we will get a dissipator, which is essentially the same as Eq. (A7), but with $\gamma(\epsilon)$ replaced by $\gamma(-\epsilon)$.

We may write both cases in a unified way as

$$\begin{aligned} D(\rho) &= \gamma(|\epsilon|)[1 - \bar{n}_F(\epsilon)][\eta\rho\eta^\dagger - \tfrac{1}{2}\{\eta^\dagger\eta, \rho\}] \\ &\quad + \gamma(|\epsilon|)\bar{n}_F(\epsilon)[\eta^\dagger\rho\eta - \tfrac{1}{2}\{\eta\eta^\dagger, \rho\}], \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

which is valid for arbitrary ϵ . This concludes our derivation of the dissipator (9). The total dissipator for all modes η_k will be a sum of dissipators with the structure (A8), each with its own Fermi-Dirac occupation number $\bar{n}_k$ and coupling constants γ_k . Since we have no direct physical model for the oscillator bath, it is not possible to determine the functional form of the coupling constants γ_k . It is also important to notice that the terms $2\bar{n}_B(\epsilon) + 1$, which we have approximated to unity, may be included inside the definition of the γ_k if one wishes. This would merely introduce a temperature dependence on the γ_k .

-
- [1] T. M. Tritt, *Thermal Conductivity: Theory, Properties and Applications* (Kluwer Academic, Dordrecht, 2004).
 - [2] N. W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics*, 1st ed. (Cengage Learning, Boston, 1976), p. 848.
 - [3] G. Grosso and G. Pastori Parravicini, *Solid State Physics*, 1st ed. (Academic Press, New York, 2000), p. 714.
 - [4] R. Landauer, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **68**, 217 (1987).
 - [5] B. J. Van Wees, H. Van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. Van Der Marel, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848 (1988).
 - [6] H. M. Pastawski, *Phys. Rev. B* **44**, 6329 (1991).
 - [7] J. Baringhaus, M. Ruan, F. Edler, A. Tejeda, M. Sicot, A. Taleb-Ibrahimi, A.-P. Li, Z. Jiang, E. H. Conrad, C. Berger, C. Tegenkamp, and W. A. de Heer, *Nature (London)* **506**, 349 (2014).
 - [8] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, 1997), p. 396.
 - [9] I. Bloch, *Nature Phys.* **1**, 23 (2005).
 - [10] B. Paredes, A. Wiedera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature (London)* **429**, 277 (2004).
 - [11] S. Diehl, A. Micheli, A. Kantian, B. Kraus, H. P. Büchler, and P. Zoller, *Nature Phys.* **4**, 878 (2008).
 - [12] S. O. Demokritov, V. E. Demidov, O. Dzyapko, G. A. Melkov, A. A. Serga, B. Hillebrands, and A. N. Slavin, *Nature (London)* **443**, 430 (2006).
 - [13] S. M. Rezende, *Phys. Rev. B* **79**, 174411 (2009).
 - [14] A. A. Serga, A. V. Chumak, and B. Hillebrands, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 264002 (2010); A. V. Chumak, A. A. Serga, and B. Hillebrands, *Nat. Commun.* **5**, 4700 (2014); A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, and B. Hillebrands, *Nature Phys.* **11**, 453 (2015).
 - [15] I. Žutić, J. Fabian, and S. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76** (2004).
 - [16] P. Högl, A. Matos-Abiague, I. Zutic, and J. Fabian, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 116601 (2015).
 - [17] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 2000).
 - [18] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957); R. Kubo, M. Yokota, and S. Nakajima, “Statistical-mechanical theory of irreversible processes. II. Response to thermal disturbance” (1957).
 - [19] S. Jeon, *Phys. Rev. D* **52**, 3591 (1995); S. Jeon and L. G. Yaffe, *ibid.* **53**, 5799 (1996).
 - [20] S. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984); W. G. Hoover, *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985).
 - [21] W. T. Coffey, Y. P. Kalmykov, and J. T. Waldron, *The Langevin Equation. With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*, 2nd ed. (World Scientific Publishing, Singapore, 2004), p. 678.
 - [22] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 1989).
 - [23] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, *J. Math. Phys.* **8**, 1073 (1967).
 - [24] M. Bolsterli, M. Rich, and W. M. Visscher, *Phys. Rev. A* **1**, 1086 (1970).
 - [25] G. Casati, J. Ford, F. Vivaldi, and W. M. Visscher, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1861 (1984).
 - [26] T. Prosen and M. Robnik, *J. Phys. A: Math. Gen.* **25**, 3449 (1999).
 - [27] K. Aoki and D. Kusnezov, *Phys. Lett.* **265**, 250 (2000); *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4029 (2001).

- [28] E. Pereira and R. Falcao, *Phys. Rev. E* **70**, 046105 (2004); *Phys. Rev. Lett.* **96**, 100601 (2006); E. Pereira, R. Falcao, and H. C. F. Lemos, *Phys. Rev. E* **87**, 032158 (2013).
- [29] D. Roy, *Phys. Rev. E* **86**, 041102 (2012).
- [30] G. T. Landi, T. Tomé, and M. J. de Oliveira, *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 395001 (2013).
- [31] G. T. Landi and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **87**, 052126 (2013); **89**, 022105 (2014); P. H. Guimarães, G. T. Landi, and M. J. de Oliveira, *ibid.* **92**, 062120 (2015).
- [32] A. Dhar, *Adv. Phys.* **57**, 457 (2008).
- [33] G. Lindblad, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
- [34] C. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 2004), p. 450.
- [35] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, New York, 2007), p. 636.
- [36] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 211 (1981).
- [37] A. O. Caldeira, *An Introduction to Macroscopic Quantum Phenomena and Quantum Dissipation*, 1st ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2014), p. 294.
- [38] A. Dhar and D. Roy, *J. Stat. Phys.* **125**, 801 (2006); K. Saito and A. Dhar, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 180601 (2007).
- [39] A. Purkayastha, M. Kulkarni, and A. Dhar, *Phys. Rev. A* **93**, 062114 (2016).
- [40] M. Bandyopadhyay and D. Segal, *Phys. Rev. E* **84**, 011151 (2011).
- [41] D. Manzano, M. Tiersch, A. Asadian, and H. J. Briegel, *Phys. Rev. E* **86**, 061118 (2012); A. Asadian, D. Manzano, M. Tiersch, and H. J. Briegel, *ibid.* **87**, 012109 (2013).
- [42] G. Benenti, G. Casati, T. Prosen, D. Rossini, and M. Žnidarič, *Phys. Rev. B* **80**, 035110 (2009).
- [43] D. Karevski and T. Platini, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 207207 (2009); T. Platini, R. J. Harris, and D. Karevski, *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 135003 (2010); arXiv:0811.3079v1.
- [44] D. Karevski, V. Popkov, and G. M. Schütz, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 047201 (2013); V. Popkov, D. Karevski, and G. M. Schütz, *Phys. Rev. E* **88**, 062118 (2013).
- [45] T. Prosen, *New J. Phys.* **10**, 043026 (2008); Z. Lenarcic and T. Prosen, *Phys. Rev. E* **91**, 030103 (2015).
- [46] T. Prosen, *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 373001 (2015); *Phys. Rev. Lett.* **106**, 217206 (2011); **107**, 137201 (2011).
- [47] T. Prosen and M. Žnidarič, *J. Stat. Mech.* (2009) P02035; *Phys. Rev. B* **86**, 125118 (2012); *Phys. Rev. Lett.* **111**, 124101 (2013).
- [48] V. Popkov, *J. Stat. Mech.* (2012) P12015; V. Popkov and R. Livi, *New J. Phys.* **15**, 023030 (2013); V. Popkov, M. Salerno, and G. M. Schütz, *Phys. Rev. E* **85**, 031137 (2012).
- [49] J. J. Mendoza-Arenas, S. Al-Assam, S. R. Clark, and D. Jaksch, *J. Stat. Mech.* (2013) P07007; J. J. Mendoza-Arenas, S. R. Clark, and D. Jaksch, *Phys. Rev. E* **91**, 042129 (2015); J. J. Mendoza-Arenas, T. Grujic, D. Jaksch, and S. R. Clark, *Phys. Rev. B* **87**, 235130 (2013).
- [50] D. Vorberg, W. Wustmann, H. Schomerus, R. Ketzmerick, and A. Eckardt, *Phys. Rev. E* **92**, 062119 (2015).
- [51] Y. Yan, C.-Q. Wu, and B. Li, *Phys. Rev. B* **79**, 014207 (2009); L. Zhang, Y. Yan, C.-Q. Wu, J.-S. Wang, and B. Li, *ibid.* **80**, 172301 (2009).
- [52] M. Žnidarič, *Phys. Rev. B* **90**, 115156 (2014); *Phys. Rev. E* **92**, 042143 (2015); *Phys. Rev. Lett.* **106**, 220601 (2011); *Phys. Rev. B* **88**, 205135 (2013).
- [53] G. T. Landi, E. Novais, M. J. de Oliveira, and D. Karevski, *Phys. Rev. E* **90**, 042142 (2014).
- [54] G. T. Landi and D. Karevski, *Phys. Rev. B* **91**, 174422 (2015).
- [55] T. Platini and D. Karevski, *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, 1711 (2007).
- [56] M. Collura and D. Karevski, *Phys. Rev. B* **89**, 214308 (2014).
- [57] W. Aschbacher, V. Jakšić, Y. Pautrat, and C. A. Pillet, *J. Math. Phys.* **48**, 032101 (2007); W. H. Aschbacher, *Lett. Math. Phys.* **79**, 1 (2007).
- [58] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys. (NY)* **16**, 407 (1961).
- [59] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Rev. Mod. Phys.* **36**, 856 (1964).
- [60] A. Sommerfeld, *Z. Phys.* **47**, 1 (1927).
- [61] L. Onsager, *Phys. Rev.* **37**, 405 (1931); **38**, 2265 (1931).

Thermal conductance of a two-level atom coupled to two quantum harmonic oscillators

Pedro H. Guimarães, Gabriel T. Landi, and Mário J. de Oliveira

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Rua do Matão, 1371, 05508-090 São Paulo, São Paulo, Brazil

(Received 26 December 2016; revised manuscript received 26 February 2017; published 5 April 2017)

We have determined the thermal conductance of a system consisting of a two-level atom coupled to two quantum harmonic oscillators in contact with heat reservoirs at distinct temperatures. The calculation of the heat flux as well as the atomic population and the rate of entropy production are obtained by the use of a quantum Fokker-Planck-Kramers equation and by a Lindblad master equation. The calculations are performed for small values of the coupling constant. The results coming from both approaches show that the conductance is proportional to the coupling constant squared and that, at high temperatures, it is proportional to the inverse of temperature.

DOI: [10.1103/PhysRevE.95.042108](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.042108)

I. INTRODUCTION

The simplest model for the interaction of atoms with radiation is given by the Rabi model [1–7], which predicts interesting properties such as the quantum Rabi oscillations [2,8]. It has a variety of applications, for instance, in quantum optics [2], quantum information [8], and the polaron problem [9]. The Rabi model couples a two-level atom to a single mode field and is represented by the quantum Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \hbar\omega a^\dagger a + \hbar g(a^\dagger + a)\sigma_x + \frac{\hbar\Omega}{2}\sigma_z, \quad (1)$$

where Ω is the atomic transition frequency, ω is the mode field frequency, and g is the coupling parameter. The operators $a^\dagger$ and a are the usual raising and lowering operators, and we are using the notation σ_x , σ_y , and σ_z for the Pauli matrices.

The Rabi model can be extended to the case of two-mode field by coupling the two-level atom to two harmonic oscillators. In this case the quantum Hamiltonian reads [10]

$$\mathcal{H} = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) + \hbar g(a_1^\dagger + a_1 + a_2^\dagger + a_2)\sigma_x + \frac{\hbar\Omega}{2}\sigma_z, \quad (2)$$

where we are considering the two modes with the same frequency ω . The raising and lowering operators obey the commutation relation $[a_i, a_i^\dagger] = 1$. In addition to the description of the interaction of matter with radiation, the Hamiltonian (2) may have other interpretations. For instance, in the context of superconducting circuits [11], it describes the coupling between a Josephson junction [12–14], represented by the two-level atom, and two transmission lines [15], represented by the two harmonic oscillators.

The Hamiltonian (2) can also be written in terms of space and momentum variables in the equivalent form

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{m\omega^2}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \hbar\varepsilon(x_1 + x_2)\sigma_x + \frac{\hbar\Omega}{2}\sigma_z, \quad (3)$$

where x_i and p_i are the pair of canonical conjugated variables, which are related to the lowering and raising operators a_i and $a_i^\dagger$ by $x_i = (\hbar/2m\omega)^{1/2}(a_i^\dagger + a_i)$ and $p_i = i(\hbar m\omega/2)^{1/2}(a_i^\dagger - a_i)$, which obey the commutation relation $[x_i, p_i] = i\hbar$. The parameter ε is related to the coupling constant g by $g = (\hbar/2m\omega)^{1/2}\varepsilon$.

Here we will consider the system described by the Hamiltonian (2), or its equivalent form (3), as being coupled to heat reservoirs at distinct temperatures. More precisely one oscillator is in contact with a heat reservoir at a higher temperature and the other oscillator is in contact with a heat reservoir at a lower temperature. This arrangement allows us to calculate the thermal conductance [16–19] as well as the rate of the entropy production [18–21] and the atomic population [2], which are the main purpose of the present study. This calculation is achieved by the use of a quantum Fokker-Planck-Kramers (FPK) equation [19], understood as the canonical quantization of the ordinary FPK equation. The calculation of the conductance and the atomic population were also performed by the use of a master equation in the Lindblad form [17,22]. In both approaches the calculations were performed for small values of the coupling constant. It is found that the conductance is proportional to the square of the coupling constant and that, at high temperatures, it is proportional to the inverse of temperature.

II. QUANTUM FPK EQUATION

A. Contact with heat reservoirs

The contact of the system described by the Hamiltonian (3) to heat reservoirs at temperatures T_i is described by the use of the quantum FPK equation [19]

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [\mathcal{H}, \rho] - \sum_i [x_i, J_i(\rho)], \quad (4)$$

where ρ is the density matrix and

$$J_i(\rho) = -\frac{\gamma}{2}(\rho G_i + G_i^\dagger \rho) - \frac{\gamma m}{i\hbar\beta_i}[x_i, \rho], \quad (5)$$

and γ is the dissipation constant, $\beta_i = 1/k_B T_i$, and G_i is the operator [19]

$$G_i = -\frac{m}{i\hbar\beta_i}(e^{\beta_i \mathcal{H}} x_i e^{-\beta_i \mathcal{H}} - x_i). \quad (6)$$

Notice that, in this description, each oscillator is in contact with one heat reservoir. When the temperatures of the reservoirs are the same, it follows that the equilibrium Gibbs distribution $\rho_0 = (1/Z)e^{-\beta\mathcal{H}}$ is the stationary solution of Eq. (4) because $J_i(\rho_0) = 0$ and because ρ_0 commutes with $\mathcal{H}$. In other words, the quantum FPK equation (4) guarantees the correct thermalization of the system.

From the quantum FPK equation one can determine the time derivative of the average of energy $U = \langle \mathcal{H} \rangle = \text{Tr}\{\mathcal{H}\rho\}$, which is given by

$$\frac{dU}{dt} = - \sum_i \phi_i, \quad (7)$$

where ϕ_i is the heat flux from the system to the reservoir i ,

$$\phi_i = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}\{[x_i, J_i] \mathcal{H}\} = -\frac{1}{m} \text{Tr}\{p_i J_i\}. \quad (8)$$

From the expression of J_i , given by (5), we get the heat flux in term of averages,

$$\phi_i = \frac{\gamma}{2m} \langle G_i p_i + p_i G_i^\dagger \rangle - \frac{\gamma}{\beta_i}. \quad (9)$$

We can also determine the time derivative of the entropy of the system $S = -k_B \text{Tr} \rho \ln \rho$, which is given by

$$\frac{dS}{dt} = \Pi - \Phi, \quad (10)$$

where Π is the rate of entropy production [19],

$$\Pi = \frac{k_B}{i\hbar} \sum_i \text{Tr}\{[x_i, J_i] (\ln \rho + \beta_i \mathcal{H})\}, \quad (11)$$

and Φ is the flux of entropy from the system to the reservoirs,

$$\Phi = \sum_i \frac{\phi_i}{T_i}. \quad (12)$$

In the case of two reservoirs at temperatures T_1 and T_2 , and in the stationary state, $\phi_1 + \phi_2 = 0$ and $\Pi = \Phi$, which allow us to write the entropy production rate in the form

$$\Pi = \phi \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right), \quad (13)$$

where $\phi = -\phi_1 = \phi_2$ is interpreted as the heat flux from reservoir 1 to the system and equal to the heat flux from the system to the reservoir 2.

When the temperatures are the same the expression (11) reduces to

$$\Pi = \frac{k_B}{i\hbar} \sum_i \text{Tr}\{[x_i, J_i] (\ln \rho - \ln \rho_0)\}, \quad (14)$$

where ρ_0 is the equilibrium distribution $\rho_0 = (1/Z)e^{-\beta\mathcal{H}}$.

B. Thermal conductance

The calculation of G_i from Hamiltonian (3) is not an easy task. However, for small values of the coupling constant ε , the calculation is straightforward, although cumbersome, and gives

$$G_i = c_i p_i + i b_i x_i + \varepsilon (\mu_i \sigma_y + i \lambda_i \sigma_x), \quad (15)$$

where

$$c_i = \frac{\sinh \beta_i \hbar \omega}{\beta_i \hbar \omega}, \quad (16)$$

$$b_i = \frac{m}{\beta_i \hbar} (\cosh \beta_i \hbar \omega - 1), \quad (17)$$

$$\mu_i = \frac{\hbar \Omega}{\Lambda} \left(-\frac{\sinh \beta_i \hbar \Omega}{\beta_i \hbar \Omega} + \frac{\sinh \beta_i \hbar \omega}{\beta_i \hbar \omega} \right), \quad (18)$$

$$\lambda_i = \frac{1}{\beta_i \Lambda} (\cosh \beta_i \hbar \Omega - \cosh \beta_i \hbar \omega), \quad (19)$$

and $\Lambda = \Omega^2 - \omega^2$.

Given G_i , the next task is to solve the quantum FPK equation (4) in the stationary state. However, instead of solving for ρ , we will solve for the correlations, such as $\langle x_i \sigma_x \rangle$, $\langle p_i \sigma_x \rangle$, $\langle x_i \sigma_y \rangle$, $\langle p_i \sigma_y \rangle$, and $\langle \sigma_z \rangle$; that is, from Eq. (4) we set up evolution equations for these quantities and solve them in the stationary regime. If $\langle A \rangle = \text{Tr}\{A\rho\}$ is one of these correlations, then from the quantum FPK equation (4) we reach the following formula for the time evolution:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, \mathcal{H}] \rangle + \sum_i \left(\frac{\gamma}{2} \langle G_i B_i + B_i G_i^\dagger \rangle + \frac{\gamma m}{i\hbar \beta_i} \langle [B_i, x_i] \rangle \right), \quad (20)$$

where B_i denotes the commutator $B_i = [A, x_i]$. Using Eq. (20) and the expression (15) for G_i , we have obtained the evolution equations for the correlations $\langle x_i \sigma_x \rangle$, $\langle x_i \sigma_y \rangle$, $\langle p_i \sigma_x \rangle$, $\langle p_i \sigma_y \rangle$, and $\langle \sigma_z \rangle$. In the stationary state these equations yields the following set of equations:

$$\langle x_1 \sigma_y \rangle + \langle x_2 \sigma_y \rangle = 0, \quad (21)$$

$$m\omega^2 \langle x_i \sigma_x \rangle + \hbar \varepsilon + \Omega \langle p_i \sigma_y \rangle + \gamma c_i \langle p_i \sigma_x \rangle = 0, \quad (22)$$

$$\langle p_i \sigma_x \rangle - m\Omega \langle x_i \sigma_y \rangle = 0, \quad (23)$$

$$m\omega^2 \langle x_i \sigma_y \rangle - \Omega \langle p_i \sigma_x \rangle + \gamma c_i \langle p_i \sigma_y \rangle + \gamma \varepsilon \mu_i - \gamma \varepsilon \lambda_i \langle \sigma_z \rangle = 0, \quad (24)$$

$$\langle p_i \sigma_y \rangle + m\Omega \langle x_i \sigma_x \rangle - 2\varepsilon \frac{u_i}{\omega^2} \langle \sigma_z \rangle = 0, \quad (25)$$

where

$$u_i = \hbar \omega \left(\frac{1}{e^{\beta_i \hbar \omega} - 1} + \frac{1}{2} \right). \quad (26)$$

Equations (21), (22), (23), (24), and (25), constitute a set of nine equations because the last four are valid for $i = 1, 2$. It is a closed set of nine equations for the nine variables $\langle \sigma_z \rangle$, $\langle x_1 \sigma_x \rangle$, $\langle x_2 \sigma_x \rangle$, $\langle x_1 \sigma_y \rangle$, $\langle x_2 \sigma_y \rangle$, $\langle p_1 \sigma_x \rangle$, $\langle p_2 \sigma_x \rangle$, $\langle p_1 \sigma_y \rangle$, $\langle p_2 \sigma_y \rangle$ and is valid for small values of the coupling constant ε . With the exception of $\langle \sigma_z \rangle$, all variables are of the order ε . Up to the first order in ε , on the other hand, the variable $\langle \sigma_z \rangle$ is independent of ε and is finite as we shall see. The solution of the set of equations above is straightforward and gives all the nine quantities in closed forms.

To determine the heat flux, we should use Eq. (9). However, instead of doing so, we use a simpler form, obtained as follows. From Eq. (20), the evolution equation for $\langle p_i^2 \rangle / 2m$ is

$$\frac{1}{2m} \frac{d}{dt} \langle p_i^2 \rangle = -\frac{\omega^2}{2} \langle p_i x_i + x_i p_i \rangle - \frac{\hbar \varepsilon}{m} \langle p_i \sigma_x \rangle - \phi_i, \quad (27)$$

where ϕ_i is given by (9). In the stationary state, the left-hand side vanishes, $\langle p_i x_i + x_i p_i \rangle = 0$, and we are left with the simpler form for the heat flux $\phi = (\hbar \varepsilon / m) \langle p_1 \sigma_x \rangle$. Using $\langle p_1 \sigma_x \rangle$ obtained from the solution of the set of Eqs. (21), (22), (23), (24), and (25), we find

$$\phi = \frac{2g^2 \gamma \Omega^2 \hbar \omega \psi_1 \psi_2 (v_1 - v_2)}{(\Gamma_1^2 + \Lambda^2) \psi_2 v_2 + (\Gamma_2^2 + \Lambda^2) \psi_1 v_1}, \quad (28)$$

where

$$\Gamma_i = \gamma \Omega c_i, \quad (29)$$

$$v_i = \frac{\hbar \Omega}{2} \coth \frac{\beta_i \hbar \Omega}{2}, \quad (30)$$

$$\psi_i = \frac{\sinh \beta_i \hbar \Omega}{\beta_i \hbar \Omega}. \quad (31)$$

We have also used the relation $g = (\hbar/2m\omega)^{1/2}\varepsilon$. From expression (28) we see that the entropy production rate Π , given by Eq. (13), is positive. Indeed, if $T_1 > T_2$ then $\beta_1 < \beta_2$ and $v_1 > v_2$ implying $\phi > 0$ and $\Pi > 0$. The same conclusion follows if $T_1 < T_2$.

It is worth to write down the average $\langle \sigma_z \rangle$, which is related to the atomic population n by $n = (1 + \langle \sigma_z \rangle)/2$. It is given by

$$\langle \sigma_z \rangle = -\frac{\hbar \Omega}{2} \frac{(\Gamma_1^2 + \Lambda^2)\psi_2 + (\Gamma_2^2 + \Lambda^2)\psi_1}{(\Gamma_1^2 + \Lambda^2)\psi_2 v_2 + (\Gamma_2^2 + \Lambda^2)\psi_1 v_1}, \quad (32)$$

valid up to linear terms in the coupling ε .

To find the conductance κ we start by writing $T_1 = T + \Delta T/2$ and $T_2 = T - \Delta T/2$. The conductance is obtained from $\kappa = \phi/\Delta T$ by taking the limit $\Delta T \rightarrow 0$ and is given by

$$\kappa = \frac{g^2 \gamma \Omega^2 \hbar \omega}{(\gamma^2 \Omega^2 c^2 + \Lambda^2)T}, \quad (33)$$

where

$$c = \frac{\sinh \beta \hbar \omega}{\beta \hbar \omega}. \quad (34)$$

When $\Omega \gg \omega$, the regime where the transitions of the two-level atom is decoupled from the oscillators, it turns out that the conductance is suppressed. This can be seen in Eq. (33) where κ vanishes in the limit $\omega/\Omega \rightarrow 0$.

When $\Delta T \rightarrow 0$, the average $\langle \sigma_z \rangle$, given by (32), approaches the value

$$\langle \sigma_z \rangle = -\tanh \frac{\beta \hbar \Omega}{2}, \quad (35)$$

which is precisely the result we expect to obtain when the temperatures of the reservoirs are the same, that is, in thermodynamic equilibrium.

It is worth mentioning that in the high-temperature limit the conductance reduces to

$$\kappa = \frac{g^2 \gamma \Omega^2 \hbar \omega}{(\gamma^2 \Omega^2 + \Lambda^2)T}, \quad (36)$$

because in this limit, $c \rightarrow 1$. On the other regime, that is, at low temperatures, we get

$$\kappa = k_B \frac{4g^2}{\gamma} (\beta \hbar \omega)^3 e^{-2\beta \hbar \omega}, \quad (37)$$

and κ vanishes when $T \rightarrow 0$.

The thermal conductance κ is shown in Fig. 1 as a function of temperature. We see that κT approaches a constant when $T \rightarrow \infty$, in accordance with expression (36) which shows that, at high temperatures, κ is proportional to the inverse of temperature.

FIG. 1. Thermal conductance κ times temperature T as a function of T according to the quantum FPK approach (33) for two values of the ratio ω/Ω . The parameters and constants g , γ , Ω , $\hbar$, and k_B are taken to be equal to unity.

III. LINDBLAD MASTER EQUATION

A. Contact with heat reservoirs

In this approach, the master equation, which gives the time evolution of the density matrix ρ , is given by [17,22]

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathcal{H}, \rho] + \mathcal{D}_1(\rho) + \mathcal{D}_2(\rho), \quad (38)$$

where here $\mathcal{H}$ is given by Eq. (2), and $\mathcal{D}_i(\rho)$ is the dissipator, which is a sum of Lindblad operators,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_i(\rho) = & \gamma(\bar{n}_i + 1)(a_i \rho a_i^\dagger - \frac{1}{2}a_i^\dagger a_i \rho - \frac{1}{2}\rho a_i^\dagger a_i) \\ & + \gamma\bar{n}_i(a_i^\dagger \rho a_i - \frac{1}{2}a_i^\dagger a_i \rho - \frac{1}{2}\rho a_i^\dagger a_i) \end{aligned} \quad (39)$$

and

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta_i \hbar \omega} - 1} \quad (40)$$

is the Bose-Einstein distribution. We remark that $\mathcal{D}_i$ are local Lindblad dissipators and that Eq. (39) gives an adequate description of the system only in the regime of weak interactions, which is precisely the regime considered here.

From the Lindblad master equation, one can calculate again the time evolution of the average energy $U = \langle \mathcal{H} \rangle = \text{Tr}\{\mathcal{H}\rho\}$ given by Eq. (7), where the heat flux ϕ_i now reads

$$\phi_i = -\text{Tr}\{\mathcal{D}_i \mathcal{H}\}. \quad (41)$$

To find an expression for the entropy production rate we start by postulating that the flux of entropy related to each reservoir is the heat flux divided by its temperature. Therefore the total entropy heat flux is

$$\Phi = \sum_i \frac{\phi_i}{T_i}. \quad (42)$$

Next we determine the time derivative of the entropy of the system $S = -k_B \text{Tr} \rho \ln \rho$ and use the expression

$dS/dt = \Pi - \Phi$ to find the rate of entropy production,

$$\Pi = -k_B \sum_i \text{Tr}\{\mathcal{D}_i(\ln \rho + \beta_i \mathcal{H})\}. \quad (43)$$

In the stationary state, $\Pi = \Phi$, and we may use expression (42) to write

$$\Phi = \phi \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right), \quad (44)$$

where $\phi = -\phi_1 = \phi_2$.

When the temperatures are the same, expression (43) reduces to

$$\Pi = -k_B \sum_i \text{Tr}\{\mathcal{D}_i(\ln \rho - \ln \rho_0)\}, \quad (45)$$

where $\rho_0 = (1/Z)e^{-\beta\mathcal{H}}$ is the equilibrium Gibbs distribution. Equation (45) gives the usual expression for the rate of entropy production associated to master equation of the Lindblad type [22].

The establishment of Eqs. (42) and (43) for the heat flux and the entropy production rate requires that the equilibrium solution of the master equation is the Gibbs state $\rho_0 = (1/Z)e^{-\beta\mathcal{H}}$, otherwise the entropy production rate will not vanish in equilibrium. This requirement means to say that $\mathcal{D}_i(\rho_0)$ should vanish when the temperatures are the same. However, the local Lindblad dissipators of the type (39) do not hold this property and should thus be understood as approximations, valid, in the present case, in the regime of weak interactions. The calculations of the heat flux and the entropy flux by Eqs. (41) and (42) should therefore be understood as approximate results, but this is only because the local dissipators (39) are approximations.

B. Thermal conductance

From the master equation we can again determine the time evolution of the quantities $\langle a_i \sigma_x \rangle$, $\langle a_i \sigma_y \rangle$, $\langle a_i^\dagger \sigma_x \rangle$, $\langle a_i^\dagger \sigma_y \rangle$, and $\langle \sigma_z \rangle$. If $\langle A \rangle = \text{Tr}\{A\rho\}$ is one of these quantities, then from the master Lindblad equation we may obtain the following formula for its time evolution:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, \mathcal{H}] \rangle + \sum_i \text{Tr}\{A\mathcal{D}_i\}. \quad (46)$$

Using these equation and the definition (39) of $\mathcal{D}_i$, we obtained the evolution of the quantities of interest. In the stationary state, these equations give the following set of equations:

$$\langle a_1 \sigma_y \rangle + \langle a_1^\dagger \sigma_y \rangle = \langle a_2 \sigma_y \rangle + \langle a_2^\dagger \sigma_y \rangle, \quad (47)$$

$$\alpha \langle a_i \sigma_x \rangle + \Omega \langle a_i \sigma_y \rangle + ig = 0, \quad (48)$$

$$\alpha^* \langle a_i^\dagger \sigma_x \rangle + \Omega \langle a_i^\dagger \sigma_y \rangle - ig = 0, \quad (49)$$

$$\alpha \langle a_i \sigma_y \rangle - \Omega \langle a_i \sigma_x \rangle + g(2\bar{n} + 1) \langle \sigma_z \rangle = 0, \quad (50)$$

$$\alpha^* \langle a_i^\dagger \sigma_y \rangle - \Omega \langle a_i^\dagger \sigma_x \rangle + g(2\bar{n} + 1) \langle \sigma_z \rangle = 0, \quad (51)$$

where $\alpha = \gamma/2 + i\omega$. This is a closed set of nine equations in the variables $\langle \sigma_z \rangle$, $\langle a_1 \sigma_x \rangle$, $\langle a_2 \sigma_x \rangle$, $\langle a_1 \sigma_y \rangle$, $\langle a_2 \sigma_y \rangle$, $\langle a_1^\dagger \sigma_x \rangle$, $\langle a_2^\dagger \sigma_x \rangle$, $\langle a_1^\dagger \sigma_y \rangle$, and $\langle a_2^\dagger \sigma_y \rangle$. Notice the last four equation are

valid for $i = 1, 2$. The set of equation is valid for small values of the coupling constant g and is easily solved to get the correlations in closed forms. Notice that, with the exception of the variable $\langle \sigma_z \rangle$, all variables are proportional to the coupling constant g whereas $\langle \sigma_z \rangle$ does not depend on g .

To obtain an expression for the heat flux, we replace the definition of $\mathcal{D}_i$, given by Eq. (39), into Eq. (41),

$$\phi_i = -\hbar\omega \text{Tr}\{a_i^\dagger a_i \mathcal{D}_i\} + \frac{\hbar g \gamma}{2} \langle (a_i^\dagger + a_i) \sigma_x \rangle. \quad (52)$$

Now, the evolution equation for the quantity $\langle a_i^\dagger a_i \rangle$ is

$$\frac{d}{dt} \langle a_i^\dagger a_i \rangle = -ig \langle (a_i^\dagger - a_i) \sigma_x \rangle + \text{Tr}\{a_i^\dagger a_i \mathcal{D}_i\}. \quad (53)$$

In the stationary state, the left-hand side vanishes. Summing up these two last equations, we obtain the the heat flux $\phi = -\phi_1$ in the form

$$\phi = i\hbar\omega g \langle (a_1^\dagger - a_1) \sigma_x \rangle - \frac{\hbar g \gamma}{2} \langle (a_1^\dagger + a_1) \sigma_x \rangle. \quad (54)$$

From $\langle a_1 \sigma_x \rangle$ and $\langle a_1^\dagger \sigma_x \rangle$, obtained from the stationary solution, we get the heat flux

$$\phi = \frac{32g^2\gamma\Omega^2\hbar\omega}{\gamma^4 + 8\gamma^2(\omega^2 + \Omega^2) + 16\Lambda^2} \frac{\bar{n}_1 - \bar{n}_2}{1 + \bar{n}_1 + \bar{n}_2}. \quad (55)$$

As we did in the previous approach, it is worthwhile to write the mean atomic population

$$\langle \sigma_z \rangle = -\frac{8\omega\Omega}{\gamma^2 + 4(\omega^2 + \Omega^2)} \frac{1}{1 + \bar{n}_1 + \bar{n}_2}. \quad (56)$$

By writing again the temperatures as $T_1 = T + \Delta T/2$ and $T_2 = T - \Delta T/2$, it is possible to obtain the thermal conductance κ . In this case it reads

$$\kappa = \frac{16g^2\gamma\Omega^2\hbar\omega}{\gamma^4 + 8\gamma^2(\omega^2 + \Omega^2) + 16\Lambda^2} \frac{1}{cT}. \quad (57)$$

In this case, the quantity $\langle \sigma_z \rangle$ becomes

$$\langle \sigma_z \rangle = -\frac{8\omega\Omega}{\gamma^2 + 4(\omega^2 + \Omega^2)} \tanh \frac{\beta\hbar\omega}{2}, \quad (58)$$

which, as we can see, does not correspond to the correct result for the thermodynamic equilibrium. This incorrect result is to be expected because local phenomenological Lindblad master equations do not lead to proper thermalization; that is, the Gibbs probability distribution $\rho_0 = (1/Z)e^{-\beta\mathcal{H}}$ is not the stationary solution of the Lindblad master equation (38).

In the high-temperature limit, the thermal conductance reduces to

$$\kappa = \frac{16g^2\gamma\Omega^2\hbar\omega}{\gamma^4 + 8\gamma^2(\omega^2 + \Omega^2) + 16\Lambda^2} \frac{1}{T}, \quad (59)$$

because $c \rightarrow 1$ in this limit. At low temperatures, on the other hand, the thermal conductance becomes

$$\kappa = k_B \frac{32g^2\gamma\Omega^2(\beta\hbar\omega)^2}{\gamma^4 + 8\gamma^2(\omega^2 + \Omega^2) + 16\Lambda^2} e^{-\beta\hbar\omega}, \quad (60)$$

and κ vanishes when $T \rightarrow 0$.

The thermal conductance κ is shown in Fig. 2 as a function of temperature. We see that κT approaches a constant when $T \rightarrow \infty$, in accordance with expression (59), which shows

FIG. 2. Thermal conductance κ times temperature T as a function of T according to the Lindblad master equation approach (57) for two values of the ratio ω/Ω . The parameters and constants g , γ , Ω , $\hbar$, and k_B are taken to be equal to unity.

that, at high temperatures, κ is proportional to the inverse of temperature. In this respect, the two approaches give similar results.

IV. DISCUSSION

We have determined the quantum conductance of a system consisting of two-level atom coupled to two harmonic oscillators by the use of two distinct methods. These two methods should be understood as two distinct theories about open quantum systems which differ in the way the contact of the system with the heat bath is treated. In the case of the quantum FPK, the contact with a heat bath is advanced in terms of a dissipation-fluctuation approach, described by each term $[x_i, J_i]$ on the summation on the right-hand side of Eq. (4). In

both cases we have set up equations for the correlations which were determined in closed form. From these correlations we have obtained the heat flux and the conductance, which is found to be proportional to coupling constant squared. At high temperature the conductance were found to be proportional to the inverse of temperature, $\kappa \sim T^{-1}$ for both cases. We point out that, at resonance, $\omega = \Omega$, and assuming γ much smaller than ω , both approaches yields the same result $\kappa = g^2 \hbar \omega / \gamma T$. At low temperature the conductance vanishes with temperature as $\kappa \sim e^{-k/T} / T^n$ with $n = 3$ for the first method and $n = 2$ for the second method. All calculations were performed for small values of the coupling constant.

We have also determined the atomic population, $n = (1 + \langle \sigma_z \rangle) / 2$. Up to linear order in the coupling constant, it is finite and, when the difference in the temperatures of the reservoirs vanish, it should be identical to the equilibrium value. Indeed this is what happens when we use the quantum FPK approach, as can be seen in Eq. (32). However, this is not the case when we use the phenomenological Lindblad master equation with local dissipators (38). In this case, the atomic population $\langle \sigma_z \rangle$, given by (58), differs from the equilibrium value.

We have also determined the rate of entropy production for the case of the quantum FPK approach. In this approach, the rate of entropy production, according to Ref. [19], is defined by Eq. (11). Using this definition, we obtain Eq. (13), which shows that the rate of entropy production is a product of the heat flux ϕ and the thermodynamic force $(T_2^{-1} - T_1^{-1})$, and proven to be positive as expected. For small values of $\Delta T = T_1 - T_2$, we may write $\Pi = \kappa (\Delta T / T)^2$, which is clearly positive because κ is positive.

ACKNOWLEDGMENTS

G.T.L. would like to acknowledge the São Paulo Research Foundation under Grant No. 2016/08721-7. P.H.G would like to acknowledge support of a fellowship from the Brazilian agency CNPq.

-
- [1] I. I. Rabi, *Phys. Rev.* **49**, 324 (1936); **51**, 652 (1937).
 - [2] M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
 - [3] J. Larson, *Physica Scr.* **76**, 146 (2007).
 - [4] D. Braak, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 100401 (2011).
 - [5] J. Larson, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 033601 (2012).
 - [6] L. Yu, S. Zhu, Q. Liang, G. Chen, and S. Jia, *Phys. Rev. A* **86**, 015803 (2012).
 - [7] Q. Xie, H. Zhong, M. T. Batchelor, and C. Lee, *J. Phys. A: Math. Theor.* **50**, 113001 (2017).
 - [8] J. M. Raimond, M. Brune, and S. Haroche, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 565 (2001).
 - [9] T. Holstein, *Ann. Phys.* **8**, 343 (1959).
 - [10] S. A. Chilingaryan and B. M. Rodriguez-Lara, *J. Phys. B* **48**, 245501 (2015).
 - [11] R. J. Schoelkopf and S. M. Girvin, *Nature (London)* **451**, 664 (2008).
 - [12] J. M. Martinis and K. Osborne, *arXiv:cond-mat/0402415*.
 - [13] J. Clarke and F. K. Wilhelm, *Nature (London)* **453**, 1031 (2008).
 - [14] M. H. Devoret, A. Wallraff, and J. M. Martinis, *arXiv:cond-mat/0411174*.
 - [15] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, *Phys. Rev. A* **69**, 062320 (2004).
 - [16] K. Saito, S. Takesue, and S. Miyashita, *Phys. Rev. E* **54**, 2404 (1996).
 - [17] A. Asadian, D. Manzano, M. Tiersch, and H. J. Briegel, *Phys. Rev. E* **87**, 012109 (2013).
 - [18] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **82**, 021120 (2010).
 - [19] M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **94**, 012128 (2016).
 - [20] E. Solano-Carrillo and A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **93**, 224305 (2016).
 - [21] E. Solano-Carrillo, *Phys. Rev. E* **94**, 062116 (2016).
 - [22] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2002).