



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO  
INSTITUTO DE FÍSICA

## Ótica quântica aplicada à termodinâmica quântica

Tiago Francisco Fagundes dos Santos

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (Física).

**Orientador: Prof. Dr. Marcelo Paleólogo Elefteriadis de França Santos**

Rio de Janeiro

Julho de 2019

# Resumo

## Ótica quântica aplicada à termodinâmica quântica

Tiago Francisco Fagundes dos Santos

**Orientador: Prof. Dr. Marcelo Paleólogo Elefteriadis de França Santos**

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

A termodinâmica quântica é uma área de pesquisa emergente da física que visa entender os princípios da termodinâmica clássica a sistemas fora do equilíbrio nos quais as flutuações de origem térmica e, principalmente, flutuações de origem quântica não podem ser ignoradas. Nesse novo cenário, onde as flutuações são essenciais para caracterizar os processos termodinâmicos, as quantidades termodinâmicas como calor, trabalho e entropia tornam-se variáveis estocásticas e obedecem os teoremas de flutuação de Crooks e Jarzynski. A termodinâmica quântica tem se desenvolvido rapidamente nos últimos anos recebendo contribuições de diversas áreas de pesquisas como a informação quântica e a ótica quântica e pode dar grandes contribuições para o desenvolvimento de novas tecnologias e no entendimento de aspectos fundamentais da física.

Neste Trabalho, estudamos a dinâmica e a termodinâmica - sob o ponto de vista da 1ª lei - de dois sistemas quânticos abertos. No contexto da termodinâmica quântica, um sistema quântico aberto pode ser pensado como uma máquina térmica quântica sob a ação de algum agente externo que é responsável pela produção de trabalho e acoplada a reservatórios que geram dissipação de calor. Veremos que diferentemente da termo-

dinâmica clássica, onde não é necessário nos preocupar com a dinâmica do sistema, no caso quântico as quantidades termodinâmicas dependem do nosso conhecimento sobre a dinâmica do sistema. Portanto, vamos começar mostrando os resultados obtidos para a dinâmica dos sistemas, e em seguida utilizaremos estes resultados para analisarmos a termodinâmica dos processos de troca de energia em cada sistema, para todos os casos estudados.

**Palavras-chave:** Termodinâmica; Sistemas quânticos abertos; Ótica quântica; Equação mestra.

# Abstract

## Quantum optics applied to quantum thermodynamics

Tiago Francisco Fagundes dos Santos

**Orientador: Prof. Dr. Marcelo Paleólogo Elefteriadis de França Santos**

*Abstract* da Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (Física).

Quantum thermodynamics is an emerging research field in physics that aims to extend the principles of classical thermodynamics to out-of-equilibrium systems in which thermal fluctuations and, mainly, quantum fluctuations can't be ignored. In this new scenario, where fluctuations are essential to characterize thermodynamic processes, thermodynamic quantities such as heat, work, and entropy production become stochastic variables and obey the fluctuation theorems of Crooks and Jarzynski. Quantum thermodynamics has been developing rapidly in recent years receiving contributions from several research areas such as quantum information and quantum optics and can make great contributions to the development of new technologies and understanding fundamental aspects of physics.

In this work, we study the dynamics and thermodynamics - from the point of view of the 1st law - of two open quantum systems. In the context of quantum thermodynamics, an open quantum system can be thought of as a quantum thermal machine under the action of some external agent that is responsible for the production of work and coupled to reservoirs that generate heat dissipation. We will see that unlike classical thermody-

namics, where it is not necessary to concern ourselves with the dynamics of the system, in the quantum case the thermodynamic quantities depend on our knowledge of system dynamics. Therefore, we will start by showing the results obtained for the dynamics of the systems, and then we will use these results to analyze the thermodynamics of the processes of energy change in each system, for all the cases studied.

**Keywords:** Thermodynamics; Open quantum systems; Quantum master equation; Quantum Optics.

## Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço aos meus pais por sempre me apoiar e me motivar a continuar estudando, mesmo nos momentos mais difíceis. Este trabalho é dedicado a eles.

Agradeço aos meus amigos por toda ajuda e apoio que sempre me deram. Agradeço em especial a, Lucas Torres Santana, Yuri Muinz de Souza e Davi Araújo Dalbuquerque Chaves, pelas diversas discussões sobre física e por todas as conversas que tivemos ao longo desses anos de UFRJ.

Agradeço ao meu orientador, Marcelo de França Santos, pelos seus ensinamentos, por sua paciência, por todo apoio dado ao longo do meu mestrado e por me mostrar uma área de pesquisa nova e completamente interessante, onde há muito a ser explorado.

Por fim, agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro.

# Sumário

<b>Sumário</b>	<b>vii</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>ix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Teoria</b>	<b>5</b>
2.1 Interação Átomo-Campo . . . . .	6
2.1.1 Campo Quantizado . . . . .	7
2.1.2 Campo Clássico . . . . .	11
2.2 Sistemas quânticos abertos . . . . .	13
2.2.1 Átomo de dois níveis acoplado a um reservatório com temperatura finita . . . . .	16
2.2.2 Bombeamento Ótico . . . . .	17
2.2.3 Saltos Quânticos . . . . .	21
2.3 Termodinâmica quântica . . . . .	23
<b>3 Dinâmica dos sistemas</b>	<b>27</b>
3.1 Modelo Semiclássico . . . . .	27
3.1.1 Caso geral . . . . .	27
3.1.2 Eliminação adiabática . . . . .	33
3.2 Modelo Quântico . . . . .	36

3.2.1	Caso Geral . . . . .	36
3.2.2	Eliminação adiabática (Etapa 1) . . . . .	42
3.2.3	Eliminação adiabática (Etapa 2) . . . . .	46
<b>4</b>	<b>Termodinâmica</b>	<b>49</b>
4.1	Modelo Semiclássico . . . . .	49
4.1.1	Caso geral . . . . .	49
4.1.2	Eliminação adiabática . . . . .	52
4.2	Modelo Quântico . . . . .	54
4.2.1	Caso geral . . . . .	54
4.2.2	Eliminação adiabática (Etapa 1) . . . . .	57
4.2.3	Eliminação adiabática (Etapa 2) . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>60</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>63</b>





# Lista de Figuras

- 2.1 Representação da dinâmica do estado do átomo  $|\psi(t)\rangle$  na esfera de Bloch . . . 11
- 2.2 Representação da evolução do estado do sistema  $|\psi(t)\rangle$  na esfera de Bloch . . . 12
- 2.3 A figura mostra um sistema de três níveis ( por exemplo, um átomo) acoplado a um reservatório térmico com uma taxa de dissipação  $\Gamma$  e o bombeamento ótico é feito com um campo externo clássico que conecta os níveis  $|g\rangle$  e  $|i\rangle$  com uma frequência  $\Omega$ . . . . . 18
- 3.1 A figura mostra um sistema quântico de três níveis (por exemplo, um átomo) acoplado a um modo campo eletromagnético clássico que conecta os níveis  $|g\rangle$  e  $|i\rangle$  com uma frequência  $\Omega$  e também a dois reservatórios independentes a temperatura zero com taxas de dissipação  $\Gamma$  e  $\gamma$ . A transição do nível  $|i\rangle$  para o nível  $|e\rangle$ (respectivamente, de  $|e\rangle$  para  $|g\rangle$ ) está associada a emissão de um fóton com energia  $\omega_{ie}$  ( $\omega_e$ ), onde  $\omega_{ie} = \omega_e$ . . . . . 28
- 3.2 Após eliminar adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  obtemos um sistema efetivo de dois níveis. onde  $\gamma$  é a taxa de emissão espontânea e  $\gamma_+$  é a taxa com que o bombeamento incoerente leva população do nível  $|g\rangle$  para o nível  $|e\rangle$ . As transições nesse sistema efetivo estão associados a absorção e a emissão de fóton de energia  $\omega_e$  devido a interação com um reservatório efetivo. . . . . 33

- 3.3 A figura mostra sistema quântico de três níveis agora acoplado a um modo de um campo eletromagnético quantizado que conecta os níveis  $|g\rangle$  e  $|i\rangle$  com uma frequência de Rabi no vácuo  $\Omega$  e também a dois reservatórios independentes a temperatura zero com taxas de dissipação  $\Gamma$  e  $\gamma$ . A transição do nível  $|i\rangle$  para o nível  $|e\rangle$  (respectivamente,  $|e\rangle$  para  $|g\rangle$ ) está associada a emissão de um fóton com energia  $\omega_{ie}$  ( $\omega_e$ ). O campo quântico externo  $F$  transfere energia para o campo acoplado ao sistema. . . . . 36
- 3.4 Estes gráficos representam as populações do sistema total com  $n = 2$ , onde  $n$  é o número de fótons, e para  $\Gamma/F = 15 \cdot 10^3$ ,  $\gamma/F = 100$ ,  $\Omega/F = 3 \cdot 10^3$ . Utilizamos como condição inicial  $\tilde{\rho}_S(0) = |g\rangle \langle g|$ . . . . . 39
- 3.5 Essa figura ilustra a dinâmica efetiva do sistema após eliminarmos adiabaticamente o nível  $|i0\rangle$ . Nesse novo cenário temos um sistema efetivo de 4 níveis, onde o efeito do campo quântico caracterizado por  $\Omega$  é levar população de  $|g1\rangle$  para  $|e0\rangle$ . . . . . 44
- 3.6 A figura representa o sistema efetivo após eliminarmos adiabaticamente os níveis  $|i0\rangle$ ,  $|g1\rangle$  e  $|e1\rangle$ . Note que, a configuração é a mesma que a obtido no modelo semiclássico ao eliminarmos adiabaticamente nível  $|i\rangle$  . . . . . 47
- 4.1 Estes gráficos representam as funções (4.10 - 4.12) quando assumimos que o estado inicial do sistema é  $\rho_S(0) = |g\rangle \langle g|$ . . . . . 52
- 4.2 Estes gráficos representam as funções (4.26 - 4.28) quando assumimos que o estado inicial do sistema é  $\rho_S(0) = |g\rangle \langle g|$  e utilizando os vínculos entre as taxas que nos permite utilizar a nossa base efetiva. . . . . 56



# Capítulo 1

## Introdução

A termodinâmica clássica é uma das teorias mais importantes e mais confiáveis na física, possuindo uma vasta gama de aplicações. Ela nos permite descrever sistemas no equilíbrio cuja a dinâmica é extremamente complexa, em termos de variáveis macroscópicas como calor, trabalho e volume. Por ser uma teoria macroscópica, a termodinâmica precisa lidar com quantidades médias. Este fato faz com que a aplicabilidade da termodinâmica seja restrita a sistemas com um número grande de partículas, ou seja, sistema que estão no limite termodinâmico, pois dessa forma podemos garantir que as flutuações em torno das médias podem ser desprezadas. Para sistemas abaixo desse limite a termodinâmica começa a perder precisão, pois conforme o tamanho do sistema diminui, mais relevantes tornam-se as flutuações em torno da média. Então, para lidar com sistemas onde a descrição termodinâmica falha, desenvolveu-se a termodinâmica estocástica.

No formalismo da termodinâmica estocástica consideramos que o sistema evolui ao longo de uma trajetória estocástica no seu espaço de fase e as quantidades termodinâmicas passam a ser variáveis estocásticas definidas ao longo de cada trajetória. Esse formalismo é aplicável quando as flutuações de origem térmica tornam-se relevantes, ou seja, para sistemas abaixo da condição do limite termodinâmico e nos fornece um melhor entendimento sobre as flutuações em torno das quantidades termodinâmicas. Na termodinâmica estocástica é possível ir além das situações no equilíbrio tratadas na termodinâmica clássica

e descrever sistemas fora do equilíbrio. Esse novo cenário de não-equilíbrio levou aos importantes teoremas de flutuação de Jarzynski [20] e Crooks [19]. Estes teoremas relacionam o trabalho realizado ao longo de um processo fora do equilíbrio com a diferença de energia livre entre os estados inicial e final. Apesar de nos permitir ir além das situações de equilíbrio, a termodinâmica estocástica lida apenas com sistemas clássicos. Quando vamos para sistemas no domínio quântico, precisamos de uma outra abordagem.

Quando lidamos com sistemas quânticos, as flutuações deixam de ser apenas térmicas em sua origem e passamos a ter também flutuações de origem quântica. Apesar de lidar com sistemas fora do equilíbrio a termodinâmica estocástica é uma teoria clássica, portanto não é capaz de lidar com as flutuações de natureza quântica. Para tentar estender a termodinâmica e física estatística fora do equilíbrio para o domínio quântico e assim tornar possível incluir as flutuações de origem quântica na descrição dos sistemas, emergiu uma nova área da física chamada termodinâmica quântica. Esta é uma área recente na física que vem se desenvolvendo rapidamente nos últimos anos. Os maiores desafios dessa nova área da física são definir e medir as quantidades termodinâmicas em sistemas quânticos. Muitos dos resultados obtidos nesta nova área são fruto da extensão de alguns conceitos da termodinâmica estocástica para o domínio quântico. Em particular, a validade dos teoremas de flutuação, obtidos através do formalismo estocástico, no regime quântico desde que calor, trabalho e produção de entropia sejam definidos de maneira consistente. A termodinâmica quântica tem se mostrado uma área de pesquisa bastante interdisciplinar, ganhando contribuições de outras áreas de pesquisa como informação quântica e ótica quântica. Um exemplo, é o uso de sistemas bombeados óticamente para analisar propriedades termodinâmicas em ótica quântica. Além dos interesses teóricos em aspectos fundamentais da física, a compreensão da termodinâmica dos processos em sistemas quânticos é de grande importância para o desenvolvimento tecnológico, uma vez que estamos caminhando cada vez mais rápido para miniaturização de dispositivos.

Nesta dissertação, vamos considerar dois casos distintos de um sistema quântico aberto

acoplado a dois reservatórios térmicos, com os quais o sistema troca calor, e sob a ação de um agente externo, que pode realizar trabalho sobre sistema ou pode ter trabalho sendo realizado sobre ele. Estudamos a dinâmica e termodinâmica desses sistemas. No primeiro caso, nosso sistema aberto é um sistema quântico de três níveis e o agente externo será um campo eletromagnético clássico que acopla o estado fundamental com o estado de maior energia no nosso sistema. Do ponto de vista termodinâmico o sistema de três níveis funciona como uma máquina térmica quântica, os reservatórios térmicos induzem dissipação de calor sobre o sistema e o campo clássico é o agente externo responsável pela produção de trabalho. No segundo caso, vamos substituir o campo clássico por um campo quantizado, dando origem a um novo sistema formado pelo sistema de três níveis mais o campo quântico e teremos como agente externo um outro campo quântico. Neste segundo caso, o campo quantizado acoplado ao sistema de três níveis pode ser interpretado como uma bateria e o outro campo que faz o papel de agente externo pode ser visto como uma tomada à qual a bateria está conectada. Em ambos os casos estamos interessados no custo termodinâmico de produzir banhos térmicos engenheirados. Utilizando cada uma das configurações apresentadas podemos calcular a produção de trabalho e o fluxo de calor em condições que levam ou não à formação do banho.

Esta dissertação está dividida em 5 capítulos. No capítulo 2, apresentaremos os elementos teóricos mínimos para entender e resolver os problemas que serão apresentados. Para isso, dividimos este capítulo em três seções. Na primeira seção vamos introduzir a teoria de interação átomo-campo para o caso particular de um átomo de dois níveis acoplado a um modo do campo eletromagnético. Na segunda seção apresentaremos a teoria de sistemas quânticos abertos. Nessa parte, nosso objetivo é derivar rapidamente a equação mestra na forma de Lindblad, discutindo sob quais condições ela pode ser obtida, e em seguida daremos dois exemplos de aplicação da equação mestra. No segundo exemplo, vamos introduzir o processo de eliminação adiabática, que é extremamente útil em problemas dinâmicos no qual uma das taxas de variação temporal é muito maior do

que as demais. Por fim, ainda na segunda seção, vamos introduzir o método de salto quânticos, que é uma ferramenta muito importante para lidar com a dinâmica de sistemas quânticos abertos muito grandes. Na terceira seção, abordaremos a termodinâmica quântica e introduziremos as definições das duas leis fundamentais da termodinâmica no domínio quântico.

No capítulo 3, vamos estudar a dinâmica dos sistemas citados anteriormente. Para isso, vamos utilizar a teoria de sistemas quânticos abertos apresentada no capítulo 2 e vamos obter, a partir da equação mestra para cada sistema, equações cujas soluções nos fornecem a dinâmica dos sistemas nos estados estacionário e transiente. Também estudaremos a dinâmica desses sistemas no regime de eliminação adiabática.

No capítulo 4, vamos estudar a termodinâmica - sob o ponto de vista da 1ª lei - de cada sistema em todos os casos analisados no capítulo anterior. Para isso, faremos uso dos resultados obtidos para dinâmica dos sistemas em cada caso e vamos obter expressões para as quantidades termodinâmicas no estado estacionário e no estado transiente.

No capítulo 5, apresentaremos as conclusões deste trabalho.



# Capítulo 2

## Teoria

Neste trabalho estudamos a dinâmica de dois sistemas quânticos abertos distintos e a termodinâmica dos processos de troca de energia envolvidos. No primeiro caso vamos estudar a dinâmica e a termodinâmica de um sistema quântico de três níveis acoplado a dois reservatórios independentes e a um campo clássico que conecta o nível de maior energia com o nível de mais baixa energia. Em seguida, vamos substituir o campo clássico por um campo quântico e estudar a dinâmica e termodinâmica nesse novo cenário.

No presente capítulo vamos introduzir os elementos teóricos mínimos necessários para entender os problemas e resolvê-los. Vamos começar falando sobre o modelo de interação átomo-campo, em particular para a interação de um átomo de dois níveis a um modo do campo eletromagnético. Apesar de simples, este modelo é amplamente utilizado em ótica quântica devido à sua aplicabilidade experimental e também porque fornece solução analítica em muitos casos. Em seguida, como estamos interessados na dinâmica dos sistemas, vamos apresentar a teoria de sistemas quânticos abertos para mostrar como descrever a dinâmica completa, incluindo a interação com reservatórios térmicos. Por fim, como também estamos interessados na termodinâmica desses sistemas, vamos introduzir a termodinâmica quântica e definir quantidades termodinâmicas como calor, trabalho, energia interna e produção de entropia de forma consistente com o nosso sistema e suas trocas de energia com o entorno.

## 2.1 Interação Átomo-Campo

Em ótica quântica, estamos frequentemente interessados em estudar a dinâmica de átomos acoplados ao campo eletromagnético (clássico ou quântico). Um dos modelos mais simples e mais importantes que nos permite estudar essa dinâmica é o de um átomo de dois níveis acoplado a um modo do campo eletromagnético. Vamos começar essa seção discutindo sobre o modelo de interação átomo-campo na aproximação de dipolo e vamos escrever a forma geral da hamiltoniana de interação nessa aproximação. Em seguida, vamos analisar o caso particular de um átomo de dois níveis acoplado a um modo do campo eletromagnético (quântico e clássico). Em ambos os casos serão dados exemplos e discutiremos a dinâmica do átomo em cada um deles.

A hamiltoniana de um sistema átomo + campo pode ser escrita como (veja [1, 4])

$$H = H_A + H_C + H_I, \quad (2.1)$$

onde  $H_A$  é a hamiltoniana do átomo,  $H_C$  é a hamiltoniana do campo livre e  $H_I$  é a hamiltoniana de interação átomo-campo.

Considerando que o comprimento de onda do campo é muito maior que as dimensões do átomo, então a variação do valor do campo na região delimitada pelo átomo pode ser ignorada, ou seja, podemos considerar que o valor do campo nessa região é constante. Essa é a chamada *aproximação de dipolo*. Em ótica quântica, essa é uma boa aproximação, pois o comprimento de onda dos campos é da ordem de algumas centenas de nanômetros, enquanto o raio atômico é da ordem de  $\text{Å}$ . Ao realizar esta aproximação temos que a contribuição dominante para a interação vem do tratamento do átomo como um dipolo. Dessa forma, a hamiltoniana de interação pode ser escrita como (veja [1, 4, 10, 11])

$$H_I = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_0) \quad (2.2)$$

onde  $r_0$  é a posição do centro de massa do átomo,  $\mathbf{d}$  é o operador de dipolo e  $\mathbf{E}$  é o

operador de campo elétrico. Substituindo (2) em (1), temos

$$H = H_0 - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_0) \quad (2.3)$$

onde,  $H_0 = H_A + H_C$ . Esta é a hamiltoniana total de um sistema átomo + campo quando vale a aproximação de dipolo. Nas próximas seções partimos dessa hamiltoniana para estudar o acoplamento de dois níveis atômicos com um modo do campo eletromagnético e analisamos dois cenários: modo quantizado e modo descrito classicamente.

### 2.1.1 Campo Quantizado

Considere que o átomo está acoplado a um modo do campo eletromagnético quântico. Logo, a hamiltoniana do campo livre ( $H_C$ ) é dada por [4, 9, 10]

$$H_C = \hbar\omega a^\dagger a. \quad (2.4)$$

Os operadores  $a^\dagger$  e  $a$  correspondem aos operadores usuais de criação e aniquilação, respectivamente, e  $\omega$  é a frequência do campo eletromagnético. O termo correspondente à energia de ponto zero é descartado, pois não contribui para a dinâmica de troca de energia entre átomo e o campo.

Escolhendo adequadamente o nível zero de energia atômica, a hamiltoniana do átomo pode ser escrita como [1, 4]

$$H_A = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z, \quad (2.5)$$

onde  $\omega_0$  é a frequência de transição atômica e  $\sigma_z = |e\rangle \langle e| - |g\rangle \langle g|$  é o operador de inversão atômica. Os estados  $|g\rangle$  e  $|e\rangle$  correspondem aos níveis fundamental e excitado do átomo, respectivamente.

As hamiltonianas (2.4) e (2.5) constituem a hamiltoniana livre. Logo, substituindo (2.4) e (2.5) em (2.3), temos

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z + \hbar\omega a^\dagger a - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_0) \quad (2.6)$$

A hamiltoniana de interação para o átomo acoplado a um modo do campo eletromagnético quantizado, na aproximação de dipolo é dada por [1, 4, 9]

$$H_I = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_0) = \hbar\lambda(a + a^\dagger)(\sigma^+ + \sigma^-), \quad (2.7)$$

onde  $\sigma^+ = |e\rangle \langle g|$  e  $\sigma^- = |g\rangle \langle e|$  são os operadores de transição atômica e  $\lambda$  é a frequência de Rabi no vácuo. Substituindo (2.8) em (2.6), obtemos

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z + \hbar\omega a^\dagger a + \hbar\lambda(a + a^\dagger)(\sigma^+ + \sigma^-). \quad (2.8)$$

Essa é a hamiltoniana total para o sistema átomo+campo escrita no quadro de Schrödinger.

Passando do quadro de Schrödinger para o quadro de interação, os termos da hamiltoniana total (2.8) que correspondem à hamiltoniana livre permanecem iguais, porém o termo correspondente à interação fica

$$\hbar\lambda(ae^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t})(\sigma^+ e^{i\omega_0 t} + \sigma^- e^{-i\omega_0 t}) \quad (2.9)$$

Note que, ao realizar essa mudança aparecem termos que oscilam com frequências  $\omega + \omega_0$  e  $\omega_0 - \omega$  na hamiltoniana de interação. Como estamos assumindo válida a aproximação de dipolo, então a frequência de transição atômica e a frequência do campo devem estar ou próximas da ressonância ( $\omega_0 \approx \omega$ ) ou na ressonância ( $\omega_0 = \omega$ ). Dessa forma, os termos com  $\omega + \omega_0$  oscilam muito mais rapidamente que os outros e podem ser descartados, pois não contribuem efetivamente para a dinâmica. Essa é a chamada *aproximação de onda girante*. Após realizar essa aproximação e voltar para o quadro de Schrödinger, a hamiltoniana total fica

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z + \hbar\omega a^\dagger a + \hbar\lambda(\sigma^+ a + \sigma^- a^\dagger). \quad (2.10)$$

Essa é a forma mais simples da interação átomo-campo e é conhecida como *modelo de Jaynes-Cummings*. Apesar da simplicidade, esse modelo é amplamente utilizado em ótica

quântica, pois descreve muito bem sistemas físicos onde dois níveis atômicos são acoplados a um modo do campo eletromagnético, por exemplo em uma cavidade ótica, e pode ser realizado experimentalmente. A seguir, vamos dar um exemplo simples com a hamiltoniana de Jaynes-Cummings.

Considere que as frequências do campo e do átomo estão em ressonância, ou seja,  $\omega = \omega_0$ , e que o estado inicial do sistema total é  $|\psi(0)\rangle = |e0\rangle$ . Dessa forma, o estado do sistema total em um dado instante de tempo  $t > 0$  pode ser escrito como

$$|\psi(t)\rangle = C_e(t) |e0\rangle + C_g(t) |g1\rangle. \quad (2.11)$$

Na ressonância, a hamiltoniana de Jaynes-Cummings fica

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z + \hbar\omega a^\dagger a + \hbar\lambda(\sigma^+ a + \sigma^- a^\dagger). \quad (2.12)$$

No quadro de interação a equação que descreve a evolução do estado do sistema é dada por ( $\hbar = 1$ )

$$i\frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H_I |\psi_I(t)\rangle. \quad (2.13)$$

Onde,

$$|\psi_I(t)\rangle = \tilde{C}_e(t) |e0\rangle + \tilde{C}_g(t) |g1\rangle. \quad (2.14)$$

Substituindo (2.14) em (2.13), obtemos

$$\dot{\tilde{C}}_e = -i\lambda\tilde{C}_g \quad (2.15)$$

$$\dot{\tilde{C}}_g = -\lambda\tilde{C}_e. \quad (2.16)$$

As soluções desse sistema de equações diferenciais acopladas são dadas por

$$\tilde{C}_e(t) = \cos(\lambda t) \quad (2.17)$$

$$\tilde{C}_g(t) = -i\text{sen}(\lambda t). \quad (2.18)$$

Substituindo (2.17) e (2.18) em (2.14) obtemos

$$|\psi_I(t)\rangle = \cos(\lambda t) |e0\rangle - i\text{sen}(\lambda t) |g1\rangle. \quad (2.19)$$

Voltando para o quadro de Schrödinger, temos

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} \cos(\lambda t) |e0\rangle - ie^{-i\omega t/2} \text{sen}(\lambda t) |g1\rangle. \quad (2.20)$$

Agora que conhecemos o estado do sistema num instante  $t$  qualquer, podemos calcular a probabilidade de ocorrer uma transição de  $|e0\rangle$  para  $|g1\rangle$  e a probabilidade do sistema permanecer no estado inicial. Logo,

$$P_e(t) = |C_e|^2 = \cos^2(\lambda t) \quad (2.21)$$

$$P_g(t) = |C_g|^2 = \text{sen}^2(\lambda t). \quad (2.22)$$

Utilizando (2.21) e (2.22), podemos obter a inversão atômica

$$\langle \sigma_z \rangle = P_e(t) - P_g(t) = \cos(2\lambda t). \quad (2.23)$$

Note que,  $\langle \sigma_z \rangle$  é função periódica, logo a população do sistema estará concentrada em  $|e0\rangle$  para  $t = \frac{n\pi}{\lambda}$  e em  $|g1\rangle$  para  $t = \frac{(2n+1)\pi}{\lambda}$ , com  $n$  inteiro e maior ou igual a zero. Para olharmos apenas para a dinâmica do átomo basta traçar fora o campo na matriz densidade do sistema total. Logo,

$$\rho_A(t) = \text{tr}_C \{ \rho_A(t) \} = \text{tr}_C \{ |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \} = \cos^2(\lambda t) |e\rangle \langle e| + \text{sen}^2(\lambda t) |g\rangle \langle g|. \quad (2.24)$$

Note que, não há coerências na dinâmica do átomo. Então, a dinâmica do átomo está contida no eixo  $z$  da esfera Bloch.

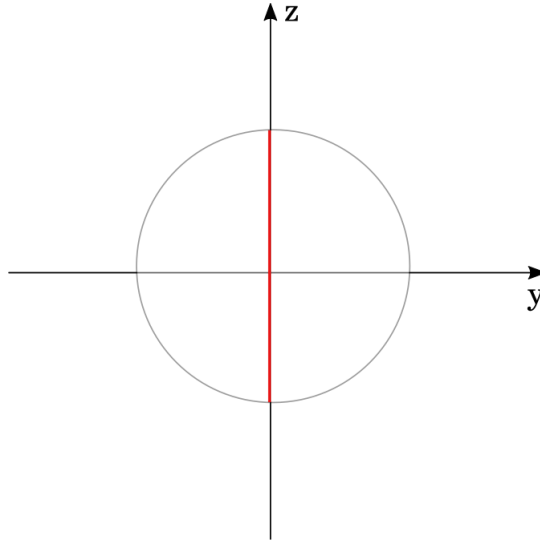


Figura 2.1: Representação da dinâmica do estado do átomo  $|\psi(t)\rangle$  na esfera de Bloch

A esfera de Bloch é uma forma de representar geometricamente o estado de um sistema quântico bidimensional, de modo que pontos na superfície da esfera correspondem a estados puros, enquanto pontos no interior da esfera correspondem a estados mistos. De fato, cada ponto (na superfície da esfera ou no interior da bola) é representado por um vetor  $r = (\langle\sigma_x\rangle, \langle\sigma_y\rangle, \langle\sigma_z\rangle)$ , onde  $\sigma_i$  é a "i-ésima" matriz de Pauli. O estado quântico  $\rho$  de um sistema de dois níveis está associado ao vetor  $r$  pela relação:  $\rho = [\mathbb{1} + \mathbf{r} \cdot (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)]/2$

A seguir vamos falar sobre o modelo semiclássico de interação átomo-campo e daremos um exemplo simples utilizando esse modelo para analisar a dinâmica do átomo.

### 2.1.2 Campo Clássico

Quando temos um campo clássico, a hamiltoniana livre é a hamiltoniana do átomo

$$H_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z. \quad (2.25)$$

Para obter a hamiltoniana de interação com o campo clássico basta substituir os operadores de criação e aniquilação por números complexos. Assim, segue que

$$H_I = \hbar g(\sigma^+ e^{-i\omega t} + \sigma^- e^{i\omega t}). \quad (2.26)$$

Logo, a hamiltoniana total fica

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z + \hbar g(\sigma^+ e^{-i\omega t} + \sigma^- e^{i\omega t}). \quad (2.27)$$

Agora, vamos considerar o exemplo dado anteriormente, porém vamos substituir o campo quantizado por um campo clássico. Dessa forma, o estado do sistema um dado instante  $t > 0$  pode ser escrito como

$$|\psi(t)\rangle = C_e(t) |e\rangle + C_g(t) |g\rangle \quad (2.28)$$

onde, estamos considerando que o estado inicial é  $|e\rangle$ . Os cálculos para obter  $C_e(t)$  e  $C_g(t)$  podem ser feitos de modo análogo ao que foi feito com o campo quantizado. Assim, o estado do sistema fica.

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} \cos(\lambda t) |e\rangle - ie^{i\omega t/2} \sin(\lambda t) |g\rangle. \quad (2.29)$$

Note que, diferentemente do que acontece com o estado do átomo com o campo quantizado, aqui há coerência. Portanto, a evolução do estado do átomo não está apenas sobre eixo z na esfera de Bloch, ela estará sobre a superfície da esfera no plano-zy.

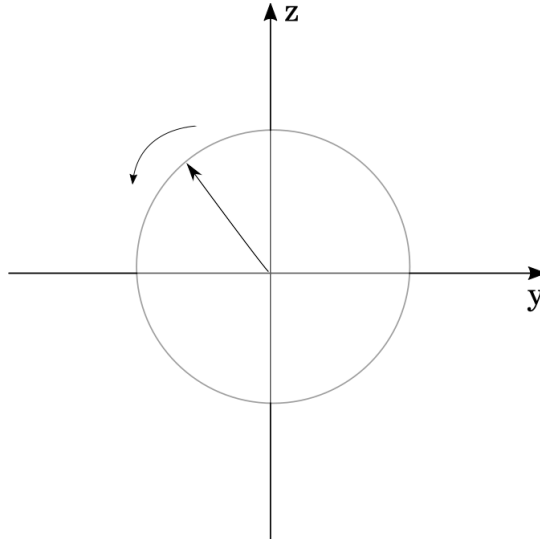


Figura 2.2: Representação da evolução do estado do sistema  $|\psi(t)\rangle$  na esfera de Bloch

Nesta seção demos dois exemplos simples de interação átomo-campo para sistemas fechados. Em particular, no primeiro exemplo, além de fechado o sistema também é



isolado, pois sua hamiltoniana não depende do tempo. Em ambos os casos a dinâmica do sistema é hamiltoniana, logo pode ser descrita por operadores unitários. Porém quando lidamos com sistemas ditos abertos, isto é, sistemas que interagem com o meio no qual estão inseridos, a dinâmica deixa de ser hamiltoniana e portanto sua evolução não pode mais ser descrita apenas em termos de operadores unitários. Na próxima seção vamos falar sobre esses sistemas e vamos mostrar como lidar com problemas envolvendo sistemas abertos de maneira apropriada.

## 2.2 Sistemas quânticos abertos

Em mecânica clássica ou mecânica quântica sistemas fechados são apenas uma idealização. Para uma descrição mais realista de um sistema físico deve-se levar em conta a existência de outros sistemas com o qual ele pode interagir, pois essa interação afeta significativamente a dinâmica do sistema. Nesta seção vamos introduzir a teoria de sistemas quânticos abertos para mostrar como analisar a dinâmica de um dado sistema físico que interage com outros sistemas nas proximidades. Para isso, vamos começar definindo o que é um sistema quântico aberto e vamos obter uma equação que descreve apropriadamente a evolução desses sistemas. Em seguida, daremos dois exemplos simples de aplicação dessa equação para estudar a dinâmica de sistemas abertos. Por fim, apresentaremos um método numérico muito importante e amplamente utilizado para simular a evolução desses sistemas.

Podemos definir um sistema quântico aberto como um sistema quântico ( $S$ ) acoplado a um outro sistema quântico ( $R$ ) que podemos chamar de reservatório, de forma que  $S + R$  formam um sistema fechado. Em ótica quântica, o reservatório é representado por um campo eletromagnético quantizado com infinitos graus de liberdade e o sistema pode ser, por exemplo, um átomo ou uma molécula. Analogamente à seção anterior, podemos

escrever a hamiltoniana total do sistema  $S + R$  como

$$H = H_S + H_R + H_{SR}, \quad (2.30)$$

onde  $H_S$  é a hamiltoniana do sistema desacoplado,  $H_R = \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k$  ( $\hbar = 1$ ) é hamiltoniana do reservatório (campo livre) e  $H_{SR}$  é a hamiltoniana que descreve a interação entre o sistema e o reservatório. Como estamos interessados apenas na dinâmica do sistema, devemos encontrar uma equação que a descreva de maneira adequada. Para isso, vamos começar assumindo que num instante inicial  $t_0 = 0$ , o estado do sistema total  $S + R$  pode ser escrito como

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_R(0). \quad (2.31)$$

Como o sistema  $S + R$  é um sistema fechado a sua dinâmica é descrita pela equação de von Neumann. Logo,

$$\dot{\rho}(t) = -i[H, \rho(t)]. \quad (2.32)$$

Para obter a equação que descreve a dinâmica de  $S$  é mais fácil trabalhar no quadro de interação. Logo, passando para o quadro de interação, temos

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = -i[\tilde{H}_{SR}, \tilde{\rho}(t)] \quad (2.33)$$

onde,  $\tilde{\rho}(t)$  é o operador densidade no quadro de interação e  $\tilde{H}_{SR}$  é a hamiltoniana de interação no quadro de interação. Integrando a equação (2.33), obtemos

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) - i \int_0^t dt' [\tilde{H}_{SR}, \tilde{\rho}(t')]. \quad (2.34)$$

Substituindo a equação (2.34) na (2.33), assumindo que vale a aproximação de dipolo para descrever a interação entre o sistema e o reservatório

$$H_{SR} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_0) \quad (2.35)$$

onde, agora o campo  $\mathbf{E}(\mathbf{r}_0)$  envolve infinitos modos de frequência  $\omega_k$ . Tomando o traço sobre o campo,

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = - \int_0^t dt' \text{tr}_R [\tilde{H}_{SR}, [\tilde{H}_{SR}, \tilde{\rho}(t')]]. \quad (2.36)$$

Neste ponto devemos realizar a aproximação de Born-Markov. Fazendo essa aproximação estamos assumindo que o acoplamento entre o sistema e o reservatório é fraco, de forma que a interação com o sistema praticamente não afeta o estado do reservatório

$$\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_R, \quad (2.37)$$

e que o tempo característico de correlção do reservatório é muito menor que o tempo de relaxação do sistema, logo podemos ignorar efeitos de memória na dinâmica do reservatório. Sob essas condições e assumindo reservatórios em equilíbrio térmico, pode-se derivar uma equação para a evolução temporal do sistema dada pela forma

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_S(t) = & -i[\tilde{H}'_{SR}, \tilde{\rho}(t)] + \sum_k \gamma_k (n+1) (L_k \tilde{\rho}_S(t) L_k^\dagger) - \frac{1}{2} \left\{ L_k^\dagger L_k, \tilde{\rho}_S(t) \right\} + \\ & + \sum_k \gamma_k n (L_k^\dagger \tilde{\rho}_S(t) L_k) - \frac{1}{2} \left\{ L_k L_k^\dagger, \tilde{\rho}_S(t) \right\}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde  $\gamma_k$  é a troca de um quantum de energia entre o sistema e o reservatório  $k$ ,  $n$  é o número médio de excitações no estado térmico do reservatório  $k$  e os operadores  $L_k$  são obtidos diretamente do termo  $H_{SR}$ . De forma compacta, a (2.38) pode ser escrita como

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = -i[\tilde{H}'_{SR}, \tilde{\rho}(t)] + \mathcal{D}(\tilde{\rho}_S). \quad (2.39)$$

A derivação da forma (2.38) é padrão, pode ser encontrada em diversos livros, como por exemplo [6, 7], e foge ao escopo desse trabalho. Nessa dissertação, assumiremos que qualquer interação com reservatórios térmicos se dará nas condições que permitem utilizar a equação (2.38).

A equação (2.38) é chamada de *equação mestra quântica Markoviana na forma de Lindblad*. O operador  $\tilde{H}'_{SR}$  leva a uma renormalização da hamiltoniana do sistema devido à flutuações no vácuo do campo e dos processos termicamente induzidos. O operador  $\mathcal{D}(\tilde{\rho}_S)$  é o operador de dissipação.

A ótica quântica é um ótimo campo para aplicação da equação mestra, pois as condições físicas necessárias para assumir válida a aproximação Markoviana são satisfeitas.

A seguir, daremos dois exemplos simples de aplicação da equação mestra.

### 2.2.1 Átomo de dois níveis acoplado a um reservatório com temperatura finita

Na seção 2.1.1 derivamos a hamiltoniana para o sistema átomo + campo considerando o acoplamento entre um átomo de dois níveis com um modo do campo eletromagnético e assumindo válidas as aproximações de dipolo e onda girante. Considerando válidas essas aproximações e que agora o acoplamento é entre um átomo de dois níveis e todos os modos do campo eletromagnético, a hamiltoniana do sistema átomo + campo pode ser escrita como ( $\hbar = 1$ )

$$H = \frac{1}{2}\omega_0\sigma_z + \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_k \lambda_k (\sigma^+ a_k + \sigma^- a_k^\dagger). \quad (2.40)$$

Os modos do campo são considerados um reservatório a temperatura finita  $T$ . A equação mestra que descreve a dinâmica do átomo, no quadro de interação, é dada por [4, 10]

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_A(t) = & \frac{\gamma}{2} (\bar{n} + 1) (2\sigma^- \rho_S(t) \sigma^+ - \sigma^+ \sigma^- \rho_S(t) - \rho_S(t) \sigma^+ \sigma^-) \\ & + \frac{\gamma}{2} \bar{n} (2\sigma^+ \rho_S(t) \sigma^- - \sigma^- \sigma^+ \rho_S(t) - \rho_S(t) \sigma^- \sigma^+) \end{aligned} \quad (2.41)$$

onde,  $\gamma$  é a taxa de emissão espontânea,  $\gamma\bar{n}$  é a taxa de emissão e absorção estimulada e  $\bar{n}$  é obtido da distribuição de Bose-Einstein. A equação (2.41) descreve o processo de emissão espontânea e os processos de emissão e absorção estimulada no átomo.

Utilizando (2.41) e a base de autoestados do átomo, obtemos

$$\dot{\tilde{\rho}}_{gg} = \gamma(\bar{n} + 1)\tilde{\rho}_{ee} - \gamma\bar{n}\tilde{\rho}_{gg} \quad (2.42)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ee} = -\gamma(\bar{n} + 1)\tilde{\rho}_{ee} + \gamma\bar{n}\tilde{\rho}_{gg} \quad (2.43)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{eg} = -\gamma(\bar{n} + \frac{1}{2})\tilde{\rho}_{eg}. \quad (2.44)$$

Aqui,  $\tilde{\rho}_{ij} = \langle i | \tilde{\rho}_A(t) | j \rangle$ . Note que, o traço da matriz densidade é conservado, pois  $\dot{\tilde{\rho}}_{gg} + \dot{\tilde{\rho}}_{ee} = 0$ .

No estado estacionário ( $\tilde{\rho}_{ij} = 0$ ) as soluções são obtidas de forma imediata

$$\tilde{\rho}_{eg}(t \rightarrow \infty) = \tilde{\rho}_{ge}(t \rightarrow \infty) = 0 \quad (2.45)$$

$$\frac{\tilde{\rho}_{ee}(t \rightarrow \infty)}{\tilde{\rho}_{gg}(t \rightarrow \infty)} = \frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} = e^{-\frac{\omega_0}{k_b T}} \quad (2.46)$$

Pela equação (2.45) vemos que as coerências vão a zero no estado estacionário e pela equação (2.46) vemos que as populações obedecem a uma distribuição de Boltzman. Então, no estado estacionário o átomo está em equilíbrio térmico com o reservatório e pode ser escrito como um estado térmico

$$\rho_A(t) = \frac{e^{-\frac{H_A}{k_b T}}}{Z}, \quad (2.47)$$

onde  $H_A = \frac{1}{2}\omega_0\sigma_z$  e  $Z$  é a função de partição.

A seguir daremos mais um exemplo de aplicação da equação mestra, porém utilizando um processo diferente daqueles que foram descritos aqui.

### 2.2.2 Bombeamento Ótico

No exemplo anterior, vimos que um dos processos que podem ocorrer devido à interação do átomo com um reservatório a uma temperatura finita é a emissão espontânea. Logo, se o átomo está no estado excitado ele pode decair espontaneamente para o estado fundamental emitindo um fóton com uma energia igual à diferença de energia entre os dois níveis atômicos. Portanto, quando isso ocorre o sistema perde energia. Uma forma de fazer o sistema voltar ao estado excitado é através do *bombeamento ótico*. Nesse processo, ocorre transferência incoerente de energia para o sistema possibilitando a transição do estado fundamental para o estado excitado. A seguir daremos um exemplo para estudar a dinâmica de um sistema de três níveis sob bombeamento ótico.

Considere o seguinte modelo

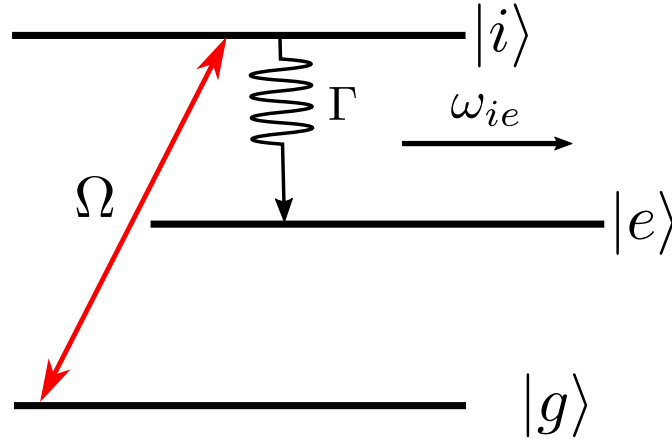


Figura 2.3: A figura mostra um sistema de três níveis ( por exemplo, um átomo) acoplado a um reservatório térmico com uma taxa de dissipação  $\Gamma$  e o bombeamento ótico é feito com um campo externo clássico que conecta os níveis  $|g\rangle$  e  $|i\rangle$  com uma frequência  $\Omega$ .

Assumindo que o reservatório está a uma temperatura  $T = 0$ , a dinâmica do sistema é descrita pela equação mestra ( $\hbar = 1$ )

$$\dot{\rho}_S(t) = -i[H_S(t), \rho_S(t)] + \frac{\Gamma}{2} (2 |e\rangle \langle i| \rho_S(t) |i\rangle \langle e| - |i\rangle \langle i| \rho_S(t) - \rho_S(t) |i\rangle \langle i|), \quad (2.48)$$

onde

$$H_S(t) = H_0 + V(t), \quad (2.49)$$

com  $H_0 = \omega_i |i\rangle \langle i| + \omega_e |e\rangle \langle e|$  e  $V(t) = \Omega(|g\rangle \langle i| e^{i\omega_i t} + |i\rangle \langle g| e^{-i\omega_i t})$ .

Reescrevendo a equação (2.48) no quadro de interação, temos

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = -i[V, \tilde{\rho}_S(t)] + \frac{\Gamma}{2} (2 |e\rangle \langle i| \tilde{\rho}_S(t) |i\rangle \langle e| - |i\rangle \langle i| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t) |i\rangle \langle i|). \quad (2.50)$$

Onde,  $V = \Omega(|g\rangle \langle i| + |i\rangle \langle g|)$ .

Utilizando (2.50) e a base de autoestados de  $H_0$ , obtemos o seguinte conjunto de

equações para a dinâmica do sistema atômico:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{gg} = -i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) \quad (2.51)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ee} = \Gamma\tilde{\rho}_{ii} \quad (2.52)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ii} = i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) - \Gamma\tilde{\rho}_{ii} \quad (2.53)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{gi} = -i\Omega(\tilde{\rho}_{ii} - \tilde{\rho}_{gg}) - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{gi} \quad (2.54)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge} = -i\Omega\tilde{\rho}_{ie} \quad (2.55)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ei} = i\Omega\tilde{\rho}_{eg} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{ei}. \quad (2.56)$$

Quando o sistema atinge o estado estacionário ( $\dot{\tilde{\rho}}_{ij} = 0$ ), obtemos as seguintes soluções:

$$\tilde{\rho}_{gg}(t \rightarrow \infty) = 0, \quad \tilde{\rho}_{ee}(t \rightarrow \infty) = 1 \quad e \quad \tilde{\rho}_{ii}(t \rightarrow \infty) = 0 \quad (2.57)$$

$$\tilde{\rho}_{gi}(t \rightarrow \infty) = 0, \quad \tilde{\rho}_{ie}(t \rightarrow \infty) = 0, \quad \tilde{\rho}_{ge}(t \rightarrow \infty) = 0. \quad (2.58)$$

Como pode-se ver por (2.57) e (2.58), as coerências vão a zero no regime estacionário e a população do sistema está concentrada no nível  $|e\rangle$ . Esse comportamento é uma consequência do bombeamento ótico incoerente para quaisquer valores de  $\Gamma$  e  $\Omega$ , pois, neste exemplo, não há mecanismos que possibilitem a transição do nível  $|e\rangle$  para os níveis  $|g\rangle$  ou  $|i\rangle$ .

Um cenário interessante de ser analisado é aquele em que temos  $\Gamma \gg \Omega$ . Quando isso ocorre, o sistema efetivamente perde memória sobre o estado  $|i\rangle$ , logo podemos eliminá-lo adiabaticamente e obter um sistema efetivo de dois níveis cuja dinâmica é descrita por uma equação mestra markoviana para os níveis  $|g\rangle$  e  $|e\rangle$ .

A eliminação adiabática é um processo matemático utilizado para reduzir a complexidade do problema quando uma das taxas é muito maior do que as outras. Para iniciar a eliminação adiabática devemos identificar as variáveis que são caracterizadas por processos de relaxação muito rápidos e colocar suas derivadas iguais a zero. Nesse exemplo, isso significa identificar quais equações diferenciais para os elementos de matriz são caracterizados por  $\Gamma$  e fazer  $\dot{\tilde{\rho}}_{jk} = 0$  nessas equações. Assim, pelas equações (2.51 - 2.56), segue

que

$$\dot{\tilde{\rho}}_{gg} = -i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) \quad (2.59)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ee} = \Gamma\tilde{\rho}_{ii} \quad (2.60)$$

$$0 = i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) - \Gamma\tilde{\rho}_{ii} \quad (2.61)$$

$$0 = -i\Omega(\tilde{\rho}_{ii} - \tilde{\rho}_{gg}) - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{gi} \quad (2.62)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge} = -i\Omega\tilde{\rho}_{ie} \quad (2.63)$$

$$0 = i\Omega\tilde{\rho}_{eg} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{ei}. \quad (2.64)$$

Substituindo (2.62) e sua conjugada em (2.61), obtemos

$$\Gamma\tilde{\rho}_{ii}\left(1 + \frac{4\Omega^2}{\Gamma^2}\right) = \frac{4\Omega^2}{\Gamma}\tilde{\rho}_{gg}. \quad (2.65)$$

Como estamos considerando  $\Gamma \gg \Omega$ , podemos assumir que termos proporcionais a  $\frac{\Omega^2}{\Gamma^2}$  contribuem muito pouco e portanto podemos escrever que  $\Gamma\tilde{\rho}_{ii}\left(1 + \frac{4\Omega^2}{\Gamma^2}\right) \approx \Gamma\tilde{\rho}_{ii}$ . Assim, obtemos

$$\Gamma\tilde{\rho}_{ii} = \frac{4\Omega^2}{\Gamma}\tilde{\rho}_{gg}. \quad (2.66)$$

Substituindo (2.66) em (2.61), temos

$$i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) = \frac{4\Omega^2}{\Gamma}\tilde{\rho}_{gg}. \quad (2.67)$$

Agora, substituindo (2.66) em (2.60), (2.67) em (2.59) e a conjugada de (2.64) em (2.63), obtemos

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_{gg} &= -\gamma_+\tilde{\rho}_{gg} \\ \dot{\tilde{\rho}}_{ee} &= \gamma_+\tilde{\rho}_{gg} \\ \dot{\tilde{\rho}}_{ge} &= -\frac{\gamma_+}{2}\tilde{\rho}_{ge} \end{aligned} \quad (2.68)$$

onde,  $\gamma_+ = \frac{4\Omega^2}{\Gamma}$ . Como pode-se ver, o processo de eliminação adiabática, de fato, levou a um conjunto de equações que descrevem a dinâmica de um sistema efetivo de dois níveis.



Logo, a equação que descreve essa dinâmica efetiva pode ser escrita como

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = \frac{\gamma_+}{2} (2 |e\rangle \langle g| \tilde{\rho}_S(t) |g\rangle \langle e| - |g\rangle \langle g| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t) |g\rangle \langle g|). \quad (2.69)$$

Note que, nesse cenário, o efeito de ligar o campo externo é bombear incoerentemente população do nível  $|g\rangle$  para o nível  $|e\rangle$  a uma taxa  $\gamma_+$ .

Os dois exemplos mostrados nessa seção são casos simples de aplicação da equação mestra quântica em sistemas com um número pequeno de estados. Porém, quando lidamos com sistemas que possuem um grande número de estados, a solução do problema pode ser uma tarefa extremamente complicada, mesmo computacionalmente. A seguir será apresentado um método numérico amplamente utilizado em física para simular sistemas quânticos abertos. Esse método é chamado de *saltos quânticos* e é equivalente à equação mestra quando se toma a média sobre um grande número de simulações.

### 2.2.3 Saltos Quânticos

O método de saltos quânticos, desenvolvido por Molmer, Castin e Dalibard [14], funciona como uma ferramenta numérica para simular a evolução não-unitária de sistemas quânticos abertos. Ao utilizar o método de saltos quânticos estamos substituindo a evolução da matriz densidade dada pela equação mestra num espaço de dimensão  $d^2$  por funções de onda num espaço de dimensão  $d$ . Logo, torna-se vantajoso utilizar esse método quando o sistema em que estamos interessados possui um grande número de estados.

Para mostrar como o método de saltos quânticos funciona vamos utilizar o exemplo de átomo de dois níveis dado em (2.2.1), pois dessa forma fica mais fácil entender como obter os operadores e as probabilidades de "Jump" e "No Jump".

O primeiro passo é obter os operadores de "Jump" e "No Jump". Para isso, vamos escrever o estado do sistema num instante  $t + \delta t$  fazendo uma expansão até a primeira ordem em  $\delta t$ . Logo, no quadro de interação

$$\tilde{\rho}_S(t + \delta t) = \tilde{\rho}_S(t) + \dot{\tilde{\rho}}_S(t) \delta t. \quad (2.70)$$

Substituindo (2.41) nesta equação, podemos reescrevê-la da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_S(t + \delta t) = & (\mathbb{1} - \frac{\gamma}{2}(\bar{n} + 1)\delta t |e\rangle \langle e| - \frac{\gamma}{2}\bar{n}\delta t |g\rangle \langle g|) \tilde{\rho}_S(t) (\mathbb{1} - \frac{\gamma}{2}(\bar{n} + 1)\delta t |e\rangle \langle e| - \frac{\gamma}{2}\bar{n}\delta t |g\rangle \langle g|) + \\ & + (\sqrt{\gamma(\bar{n} + 1)\delta t} |g\rangle \langle e|) \tilde{\rho}_S(t) (\sqrt{\gamma(\bar{n} + 1)\delta t} |e\rangle \langle g|) + \\ & + (\sqrt{\gamma\bar{n}\delta t} |e\rangle \langle g|) \tilde{\rho}_S(t) (\sqrt{\gamma\bar{n}\delta t} |g\rangle \langle e|) \end{aligned} \quad (2.71)$$

Aqui estamos desprezando termos de  $\mathcal{O}(\delta t^2)$ . Pela equação (2.71) podemos definir os operadores de "Jump" e "No Jump" como

$$J_0 := [\mathbb{1} - \frac{\gamma}{2}(\bar{n} + 1)\delta t |e\rangle \langle e| - \frac{\gamma}{2}\bar{n}\delta t |g\rangle \langle g|] \quad (2.72)$$

$$J_1 := [\sqrt{\gamma(\bar{n} + 1)\delta t} |g\rangle \langle e|] \quad (2.73)$$

$$J_2 := [\sqrt{\gamma\bar{n}\delta t} |e\rangle \langle g|] \quad (2.74)$$

Agora, suponha que em um dado instante de tempo  $t$  o estado do sistema é representado por  $|\psi(t)\rangle$ . A probabilidade de ocorrer um salto quando  $|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t + \delta t)\rangle$  é dada por

$$\begin{aligned} p = p_1 + p_2 = & \langle \psi(t) | J_1^\dagger J_1 | \psi \rangle + \langle \psi(t) | J_2^\dagger J_2 | \psi \rangle \\ = & \gamma(\bar{n} + 1)\delta t |\langle e | \psi \rangle|^2 + \gamma\bar{n}\delta t |\langle g | \psi \rangle|^2 \end{aligned} \quad (2.75)$$

e a probabilidade de não ocorrer um salto é simplesmente  $p_0 = 1 - p$ . Definidos os operadores e definidas as probabilidades, estamos prontos para introduzir o algoritmo.

Suponha que num instante inicial  $t = t_0$  o estado do sistema seja representado por  $|\psi(t_0)\rangle$ . Utilizando (2.75) calculamos as probabilidades de não ocorrer e de ocorrer um salto quando  $|\psi(t_0)\rangle \rightarrow |\psi(t_0 + \delta t)\rangle$ . Em seguida, sorteamos um número  $\epsilon \in [0, 1]$  utilizando uma distribuição uniforme. Se o número  $\epsilon$  sorteado for maior que  $p$  então dizemos que não ocorre o salto, logo o estado do sistema em  $t_0 + \delta t$  é dado por

$$|\psi(t_0 + \delta t)\rangle = \frac{J_0 |\psi(t_0)\rangle}{\sqrt{p_0}}. \quad (2.76)$$

Se o número sorteado for menor ou igual a  $p$ , então dizemos que ocorre um salto. Nesse caso devemos sortear novamente um número  $\nu \in [0, 1]$  utilizando uma distribuição uni-

forme e normalizar as probabilidades

$$\tilde{p}_j = \frac{p_j}{p}. \quad (2.77)$$

Se o número  $\nu$  sorteado for menor ou igual a  $\tilde{p}_1$ , o estado do sistema em  $t_0 + \delta t$  será

$$|\psi(t_0 + \delta t)\rangle = \frac{J_1 |\psi(t_0)\rangle}{\sqrt{p_1}}. \quad (2.78)$$

Se o número  $\nu$  sorteado for maior que  $\tilde{p}_1$ , então o estado do sistema em  $t_0 + \delta t$  fica

$$|\psi(t_0 + \delta t)\rangle = \frac{J_2 |\psi(t_0)\rangle}{\sqrt{p_2}}. \quad (2.79)$$

Para obter o estado do sistema em um instante de tempo  $t_n = t_0 + n\delta t$  esse procedimento deve ser realizado  $n$  vezes, de forma que para um instante de tempo  $t_k = t_0 + k\delta t$  o estado inicial é  $|\psi(t_0 + (k-1)\delta t)\rangle$ . Para obter a matriz densidade em um instante de tempo qualquer com esse método deve-se realizar essa simulação  $N$  vezes, tal que  $N \gg 1$ , e calcular a média no ensemble

$$\tilde{\rho}_S(t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)|. \quad (2.80)$$

Na próxima seção veremos que a teoria de sistemas quânticos abertos está intimamente ligada a termodinâmica quântica, e que podemos aplicar modelos utilizados em ótica quântica à termodinâmica quântica.

## 2.3 Termodinâmica quântica

A termodinâmica quântica surge da conexão entre duas teorias independentes: a termodinâmica e a mecânica quântica. Uma das formas de estabelecer essa conexão é através da teoria de sistemas quânticos abertos quando investigamos sistemas quânticos fracamente acoplados a reservatórios tal que, sob certas condições, a dinâmica do sistema pode ser descrita pela equação (2.38).

Assumindo que um sistema fracamente acoplado a  $N$  reservatórios pode ter sua dinâmica descrita pela equação mestra Markoviana, Alicki [6] definiu calor e trabalho para sistemas com hamiltonianas dependentes do tempo da seguinte forma:

$$\langle Q \rangle := \int_0^t \text{tr} \{ \dot{\rho}_S(t') H_S(t') \} dt' \quad (2.81)$$

$$\langle W \rangle := \int_0^t \text{tr} \left\{ \rho_S(t') \dot{H}_S(t') \right\} dt'. \quad (2.82)$$

É importante notar que essas definições de calor e trabalho são válidas apenas no quadro de Schrödinger. A definição de trabalho na equação (2.82) foi introduzida pela primeira vez por Pusz and Woronowicz [46]. A partir das equações (2.81) e (2.82) podemos definir fluxo de calor e produção de trabalho como

$$\langle \dot{Q} \rangle := \text{tr} \{ \dot{\rho}_S(t') H_S(t') \} \quad (2.83)$$

$$\langle \dot{W} \rangle := \text{tr} \left\{ \rho_S(t') \dot{H}_S(t') \right\}. \quad (2.84)$$

Para um sistema quântico num estado  $\rho_S(t)$  com uma hamiltoniana dependente do tempo  $H_S(t)$ , a energia interna é dada por

$$\langle U(t) \rangle = \text{tr} \{ \rho_S(t) H_S(t) \}. \quad (2.85)$$

Logo, somando as equações (2.81) e (2.82), obtemos

$$\langle Q \rangle + \langle W \rangle = \int_0^t \frac{d}{dt'} \text{tr} [\rho_S(t') H_S(t')] dt = \text{tr} [\rho_S(t) H_S(t)] - \text{tr} [\rho_S(0) H_S(0)] := \Delta U. \quad (2.86)$$

Essa é a *1ª lei da termodinâmica*. Dessa forma, podemos dizer que variações de energias que ocorrem de forma controlada estão associadas à produção de trabalho e variações de energia que ocorrem de forma não controlada estão associadas a troca de calor do sistema com o reservatório.

O fato de poder escrever a variação da energia interna do sistema em termos de calor e trabalho é muito útil para darmos uma definição da *2ª lei da termodinâmica* através da *desigualdade de Claussius*.

$$\Delta S \geq \int \frac{\delta Q}{T}. \quad (2.87)$$

A notação  $\delta Q$  é utilizada para dizer que calor não é uma função de estado, e portanto não possui uma diferencial exata. Note que, contudo, se assumirmos que o sistema está em contato com um reservatório à temperatura zero, a (2.87) diverge. Para contornar esse problema podemos utilizar o formalismo de *trajetórias quânticas* que nos permite calcular a *produção de entropia* em cada trajetória.

Em termodinâmica estocástica o sistema segue uma trajetória no seu espaço fase associada com o processo termodinâmico estudado. Nesse formalismo, quantidades termodinâmicas como calor, trabalho e entropia tornam-se variáveis estocásticas definidas em cada trajetória.

No caso clássico a produção de entropia pode ser calculada através do *teorema de Crooks* [19]

$$e^{\Delta_i S} = \frac{P[x(t)]}{\tilde{P}[\tilde{x}(t)]}, \quad (2.88)$$

onde,  $\Delta_i S$  é a produção de entropia,  $P[x(t)]$  é a probabilidade da trajetória direta no espaço de fase e  $\tilde{P}[\tilde{x}(t)]$  é a probabilidade da trajetória inversa no espaço de fase.

Em concordância com o formalismo clássico (teorema de Crooks) de termodinâmica estocástica, a produção de entropia no domínio quântico pode ser definida comparando a probabilidade da trajetória direta  $\vec{\Sigma}$  com a probabilidade da trajetória inversa  $\tilde{\Sigma}$ . Assim, segue que

$$\Delta_i S = \ln \left( \frac{P[\vec{\Sigma}]}{\tilde{P}[\tilde{\Sigma}]} \right), \quad (2.89)$$

onde  $P[\vec{\Sigma}]$  é a probabilidade da trajetória direta no espaço de Hilbert e  $\tilde{P}[\tilde{\Sigma}]$  é a probabilidade da trajetória inversa no espaço de Hilbert. Essas trajetórias correspondem a uma sequência de estados puros seguidos por um sistema quântico aberto quando o reservatório é continuamente monitorado e podemos acessar os resultados obtidos das medidas realizadas. Dessa forma, as trajetórias quânticas podem ser pensadas como um análogo das trajetórias estocásticas, no espaço de Hilbert. As probabilidades de trajetórias diretas e inversas dependem da sequência de saltos geradas a partir de um determinado protocolo.

Não daremos muitos detalhes sobre produção de entropia e trajetórias quânticas, pois foge do escopo do que será apresentado neste trabalho. Para uma discussão mais detalhada sobre produção de entropia e trajetórias quânticas, veja, por exemplo [24, 33, 35].

Utilizando (2.89) para calcular o valor médio da produção de entropia sobre todas as trajetórias, obtemos [35]

$$\left\langle \Delta_i S[\vec{\Sigma}] \right\rangle_{\vec{\Sigma}} \geq 0. \quad (2.90)$$

Esse resultado verifica a 2ª lei da termodinâmica

Nos próximos capítulos, utilizaremos a base teórica apresentada nesse capítulo para estudar a dinâmica e a termodinâmica em dois sistemas abertos distintos.

# Capítulo 3

## Dinâmica dos sistemas

Neste capítulo vamos estudar a dinâmica de dois sistemas abertos distintos nos regimes estacionário e transiente. Começaremos com um modelo semiclássico constituído de um sistema quântico de três níveis acoplado a dois reservatórios independentes e a um modo de um campo eletromagnético clássico. Em seguida, vamos substituir o campo clássico por um campo quântico e veremos o que muda na dinâmica do sistema quando realizamos essa troca.

### 3.1 Modelo Semiclássico

#### 3.1.1 Caso geral

O primeiro modelo utilizado em nosso trabalho é bem parecido com o que foi mostrado no exemplo de bombeamento ótico dado no capítulo anterior. A diferença é que aqui vamos considerar que o sistema de três níveis está acoplado a dois reservatórios independentes à temperatura zero.

Como ambos os reservatórios estão à temperatura zero, o único processo que ocorre devido à interação do sistema com os reservatórios é a emissão espontânea. Logo, a equação mestra que descreve a dinâmica do sistema é dada por ( $\hbar = 1$ )

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S(t) = & -i[H_S(t), \rho_S(t)] + \frac{\Gamma}{2} (2|e\rangle \langle i| \rho_S(t) |i\rangle \langle e| - |i\rangle \langle i| \rho_S(t) - \rho_S(t) |i\rangle \langle i|) \\ & + \frac{\gamma}{2} (2|g\rangle \langle e| \rho_S(t) |e\rangle \langle g| - |e\rangle \langle e| \rho_S(t) - \rho_S(t) |e\rangle \langle e|) \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde, a hamiltoniana  $H_S(t)$  é a dada por (2.49). A dinâmica descrita por (3.1) pode ser ilustrada pela seguinte figura

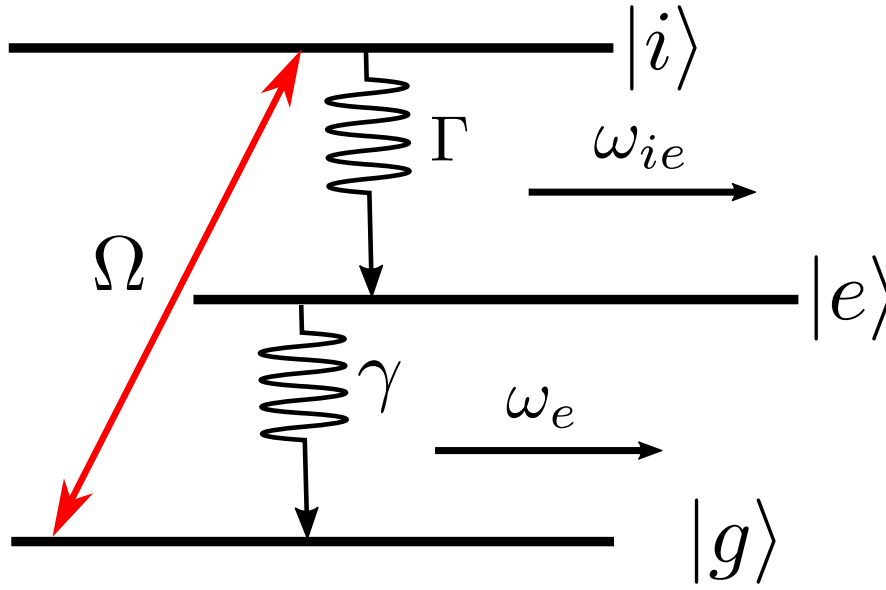


Figura 3.1: A figura mostra um sistema quântico de três níveis (por exemplo, um átomo) acoplado a um modo campo eletromagnético clássico que conecta os níveis  $|g\rangle$  e  $|i\rangle$  com uma frequência  $\Omega$  e também a dois reservatórios independentes a temperatura zero com taxas de dissipação  $\Gamma$  e  $\gamma$ . A transição do nível  $|i\rangle$  para o nível  $|e\rangle$  (respectivamente, de  $|e\rangle$  para  $|g\rangle$ ) está associada a emissão de um fóton com energia  $\omega_{ie}$  ( $\omega_e$ ), onde  $\omega_{ie} = \omega_e$ .

Para tornar a solução do problema um pouco mais fácil vamos passar para o quadro de interação. No quadro de interação a equação (3.1), fica

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_S(t) = & -i[V, \tilde{\rho}_S(t)] + \frac{\Gamma}{2} (2|e\rangle \langle i| \tilde{\rho}_S(t) |i\rangle \langle e| - |i\rangle \langle i| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t) |i\rangle \langle i|) \\ & + \frac{\gamma}{2} (2|g\rangle \langle e| \tilde{\rho}_S(t) |e\rangle \langle g| - |e\rangle \langle e| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t) |e\rangle \langle e|). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Utilizando (3.2) e a base de autoestados de  $H_0$ , geramos o seguinte conjunto de equações



diferenciais para a dinâmica do sistema de três níveis:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{gg} = -i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) + \gamma\tilde{\rho}_{ee} \quad (3.3)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ee} = \Gamma\tilde{\rho}_{ii} - \gamma\tilde{\rho}_{ee} \quad (3.4)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ii} = i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) - \Gamma\tilde{\rho}_{ii} \quad (3.5)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{gi} = -i\Omega(\tilde{\rho}_{ii} - \tilde{\rho}_{gg}) - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{gi} \quad (3.6)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge} = -i\Omega\tilde{\rho}_{ie} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{ge} \quad (3.7)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ei} = i\Omega\tilde{\rho}_{eg} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{ei} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{ei}. \quad (3.8)$$

Note que, as equações (3.3 - 3.8) são acopladas, portanto obter as soluções para dinâmica do sistema não é uma tarefa simples. Mas, quando o sistema atinge o estado estacionário ( $\dot{\tilde{\rho}}_{ij} = 0$ ) o problema se torna mais fácil, pois não temos mais que lidar com equações diferenciais acopladas

$$-i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) + \gamma\tilde{\rho}_{ee} = 0 \quad (3.9)$$

$$\Gamma\tilde{\rho}_{ii} - \gamma\tilde{\rho}_{ee} = 0 \quad (3.10)$$

$$i\Omega(\tilde{\rho}_{ig} - \tilde{\rho}_{gi}) - \Gamma\tilde{\rho}_{ii} = 0 \quad (3.11)$$

$$i\Omega(\tilde{\rho}_{ii} - \tilde{\rho}_{gg}) + \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{gi} = 0 \quad (3.12)$$

$$i\Omega\tilde{\rho}_{ie} + \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{ge} = 0 \quad (3.13)$$

$$i\Omega\tilde{\rho}_{eg} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{ei} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{ei} = 0. \quad (3.14)$$

Logo, para dinâmica do sistema no estado estacionário encontramos as seguintes soluções:

$$\tilde{\rho}_{gg} = \frac{\gamma(\Gamma^2 + 4\Omega^2)}{\gamma\Gamma^2 + 4(2\gamma + \Gamma)\Omega^2} \quad (3.15)$$

$$\tilde{\rho}_{ee} = \frac{4\Gamma\Omega^2}{\gamma\Gamma^2 + 4(2\gamma + \Gamma)\Omega^2} \quad (3.16)$$

$$\tilde{\rho}_{ii} = \frac{4\gamma\Omega^2}{\gamma\Gamma^2 + 4(2\gamma + \Gamma)\Omega^2} \quad (3.17)$$

$$\tilde{\rho}_{gi} = \frac{2i\gamma\Gamma\Omega}{\gamma\Gamma^2 + 4(2\gamma + \Gamma)\Omega^2} \quad (3.18)$$

$$\tilde{\rho}_{ge} = 0 \quad (3.19)$$

$$\tilde{\rho}_{ei} = 0. \quad (3.20)$$

Note que, essas soluções são válidas para quaisquer valores de  $\Gamma$ ,  $\gamma$  e  $\Omega$ . Para verificar se o traço da matriz densidade é preservado, basta somarmos (3.15), (3.16) e (3.17). Logo,

$$tr \{ \tilde{\rho}_S \} = \tilde{\rho}_{gg} + \tilde{\rho}_{ee} + \tilde{\rho}_{ii} = 1. \quad (3.21)$$

Como podemos ver pelo resultado acima, o traço da matriz  $\tilde{\rho}_S(t)$  é preservado. Note também que, como esperado, se fizermos  $\gamma = 0$ , recuperamos os mesmo resultados obtidos no exemplo de bombeamento ótico dado no capítulo 2. Agora, se considerarmos  $\Gamma$  muito maior do que as outras taxas nas soluções obtidas, recuperamos (2.66) e (2.67) e para  $\gamma = 0$  chegamos as soluções que podem ser obtidas a partir de (2.68) para o estado estacionário, ou seja  $\tilde{\rho}_{ee} = 1$  e todas as outras variáveis são iguais a zero. Se também quisermos conhecer o sistema no estado transiente, temos que encontrar as soluções para (3.3 - 3.8).

Diferentemente do estado estacionário, no estado transiente o problema não é simples de ser tratado de forma analítica. Porém, se atribuirmos vínculos as taxas, as soluções podem ser obtidas com certa facilidade. Por exemplo, considerando,  $\Gamma/\Omega = 4$  e  $\gamma/\Omega = 2$ , obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{gg}(t) = & \frac{e^{-4\Omega t}}{8} (5e^{4\Omega t} - 1 + 2\tilde{\rho}_{gg}(0) + 2i\tilde{\rho}_{gi}(0) + 6\tilde{\rho}_{ii}(0) - 2i\tilde{\rho}_{ig}(0) + 2e^{2\Omega t}((3\tilde{\rho}_{gg}(0) - 2 - 3\tilde{\rho}_{ii}(0) \\ & + i\tilde{\rho}_{ig}(0) - i\tilde{\rho}_{gi}(0))\cos(2\Omega t) + (1 + \tilde{\rho}_{gg}(0) + 3i(\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0)) - \tilde{\rho}_{ii}(0))\sen(2\Omega t))) \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{ee}(t) = & \frac{e^{-4\Omega t}}{4}(e^{4\Omega t} + 1 - 2\tilde{\rho}_{gg}(0) - 2i\tilde{\rho}_{gi}(0) - 6\tilde{\rho}_{ii}(0) + 2i\tilde{\rho}_{ig}(0) + 2e^{2\Omega t}((1 - \tilde{\rho}_{gg}(0) + \tilde{\rho}_{ii}(0) \\ & + i\tilde{\rho}_{gi}(0) - i\tilde{\rho}_{ig}(0))\cos(2\Omega t) - (\tilde{\rho}_{gg}(0) + i(\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0)) - \tilde{\rho}_{ii}(0))\sen(2\Omega t)))\end{aligned}\quad (3.23)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{ii}(t) = & \frac{e^{-4\Omega t}}{8}(e^{4\Omega t} - 1 + 2\tilde{\rho}_{gg}(0) + 2i\tilde{\rho}_{gi}(0) + 6\tilde{\rho}_{ii}(0) - 2i\tilde{\rho}_{ig}(0) + 2e^{2\Omega t}((\tilde{\rho}_{ii}(0) - \tilde{\rho}_{gg}(0) \\ & + i\tilde{\rho}_{ig}(0) - i\tilde{\rho}_{gi}(0))\cos(2\Omega t) + (1 + \tilde{\rho}_{gg}(0) + 3i(\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0)) - \tilde{\rho}_{ii}(0))\sen(2\Omega t)))\end{aligned}\quad (3.24)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{gi}(t) = & \frac{e^{-2\Omega t}}{4}(ie^{2\Omega t} + 2(\tilde{\rho}_{gi}(0) + \tilde{\rho}_{ig}(0)) + (2\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0) - i)\cos(2\Omega t) \\ & + i(2\tilde{\rho}_{gg}(0) - 2\tilde{\rho}_{ii}(0) - 1)\sen(2\Omega t))\end{aligned}\quad (3.25)$$

$$\tilde{\rho}_{ge}(t) = e^{-2\Omega t}(\tilde{\rho}_{ge}(0) + \Omega t(\tilde{\rho}_{ge}(0) - i\tilde{\rho}_{ie}(0)))\quad (3.26)$$

$$\tilde{\rho}_{ei}(t) = e^{-2\Omega t}(\tilde{\rho}_{ei}(0) - \Omega t(\tilde{\rho}_{ei}(0) - i\tilde{\rho}_{eg}(0))).\quad (3.27)$$

Com estas soluções temos toda a informação sobre o sistema no estado transiente para valores de  $\Gamma$ ,  $\gamma$  e  $\Omega$  que respeitem o vínculo imposto, e com condições iniciais arbitrárias. Utilizando (3.22 - 3.27) podemos obter, para este caso, as soluções para o regime estacionário tomando o limite de  $t \rightarrow \infty$ . Logo,

$$\tilde{\rho}_{gg}(t \rightarrow \infty) = \frac{5}{8}\quad (3.28)$$

$$\tilde{\rho}_{ee}(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{4}\quad (3.29)$$

$$\tilde{\rho}_{ii}(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{8}\quad (3.30)$$

$$\tilde{\rho}_{gi}(t \rightarrow \infty) = \frac{i}{4}\quad (3.31)$$

$$\tilde{\rho}_{ge}(t \rightarrow \infty) = 0\quad (3.32)$$

$$\tilde{\rho}_{ei}(t \rightarrow \infty) = 0.\quad (3.33)$$

Para verificar se as soluções obtidas para o estado transiente são consistentes, podemos utilizar os mesmos vínculos do exemplo nas equações (3.15 - 3.20) e obter as soluções para o estado estacionário do sistema. Fazendo isso, é fácil ver que chegamos aos mesmo resultado de (3.28 - 3.33). Com isso, mostramos que é possível obter soluções analíticas gerais para

a dinâmica do sistema no estado estacionário, e que atribuindo vínculos as taxas podemos obter soluções para a dinâmica do sistema com condições iniciais arbitrárias.

Até aqui, temos soluções para dinâmica do sistema no estado estacionário e estado transiente no caso geral. Agora, vamos ver o que acontece com a dinâmica do sistema no limite em que podemos eliminar adiabaticamente o nível  $|i\rangle$ .

### 3.1.2 Eliminação adiabática

Como no exemplo dado na seção 2.2.2, a condição necessária para que possamos eliminar adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  é que  $\Gamma$  seja muito maior do que as outras taxas do problema. Então, considerando que essa condição é satisfeita, podemos proceder de maneira análoga ao exemplo dado e assim chegamos ao seguinte conjunto de equações:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{gg} = -\gamma_+ \tilde{\rho}_{gg} + \gamma \tilde{\rho}_{ee} \quad (3.34)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ee} = \gamma_+ \tilde{\rho}_{gg} - \gamma \tilde{\rho}_{ee} \quad (3.35)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge} = -i \frac{\gamma_+}{2} \tilde{\rho}_{ge} - \frac{\gamma}{2} \tilde{\rho}_{ge}. \quad (3.36)$$

Onde,  $\gamma_+ := \frac{4\Omega^2}{\Gamma}$ . Como no exemplo dado, ao eliminarmos adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  obtemos um sistema efetivo de dois níveis, onde o papel do campo neste cenário é bombear incoerentemente população do nível  $|g\rangle$  para o nível  $|e\rangle$ . Aqui aparecem termos extras nas equações devido ao acoplamento com um segundo reservatório que provoca transição do nível  $|e\rangle$  para o nível  $|g\rangle$  por emissão espontânea.

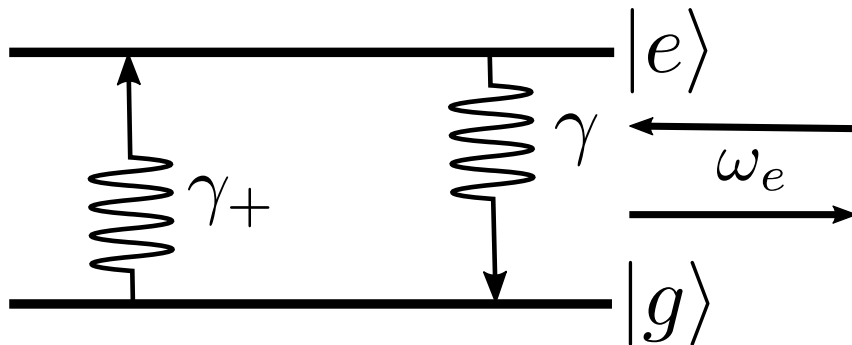


Figura 3.2: Após eliminar adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  obtemos um sistema efetivo de dois níveis, onde  $\gamma$  é a taxa de emissão espontânea e  $\gamma_+$  é a taxa com que o bombeamento incoerente leva população do nível  $|g\rangle$  para o nível  $|e\rangle$ . As transições nesse sistema efetivo estão associadas a absorção e a emissão de fóton de energia  $\omega_e$  devido a interação com um reservatório efetivo.

Pelas equações (3.34 - 3.36), a equação mestra que descreve a dinâmica efetiva do

sistema é dada por

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_S(t) = & \frac{\gamma_+}{2} (2 |e\rangle \langle g| \tilde{\rho}_S(t) |g\rangle \langle e| - |g\rangle \langle g| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t) |g\rangle \langle g|) + \\ & \frac{\gamma}{2} (2 |g\rangle \langle e| \tilde{\rho}_S(t) |e\rangle \langle g| - |e\rangle \langle e| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t) |e\rangle \langle e|). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Para obter as soluções das equações (3.34 - 3.36) da forma mais geral possível, vamos assumir que inicialmente o sistema efetivo está num estado arbitrário  $\rho_S(0)$ , tal que  $\rho_{gg}(0) + \rho_{ee}(0) = 1$ . Por integração direta em (3.36), obtemos

$$\tilde{\rho}_{ge}(t) = \tilde{\rho}_{ge}(0) e^{-\frac{(\gamma_+ + \gamma)}{2} t}. \quad (3.38)$$

Para as equações (3.34) e (3.35), vamos utilizar o fato de que o traço da matriz densidade é igual a um em qualquer instante de tempo. Assim, elas podem ser reescritas como

$$\dot{\tilde{\rho}}_{gg} = \gamma - \tilde{\rho}_{gg}(\gamma_+ + \gamma) \quad (3.39)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ee} = \gamma_+ - \tilde{\rho}_{ee}(\gamma_+ + \gamma). \quad (3.40)$$

Logo, as equações podem ser facilmente resolvidas por integração direta e as soluções são dadas por

$$\tilde{\rho}_{gg}(t) = \frac{e^{-(\gamma_+ + \gamma)t}}{\gamma_+ + \gamma} (\gamma(e^{(\gamma_+ + \gamma)t} - 1) + \tilde{\rho}_{gg}(0)(\gamma_+ + \gamma)) \quad (3.41)$$

$$\tilde{\rho}_{ee}(t) = \frac{e^{-(\gamma_+ + \gamma)t}}{\gamma_+ + \gamma} (\gamma_+(e^{(\gamma_+ + \gamma)t} - 1) + \tilde{\rho}_{ee}(0)(\gamma_+ + \gamma)). \quad (3.42)$$

Note que, para obter as soluções no regime transiente quando eliminamos adiabaticamente no nível  $|i\rangle$  não é necessário assumir nenhum vínculo sobre as taxas  $\gamma_+$  e  $\gamma$ .

A partir de (3.38), (3.41) e (3.42), podemos obter soluções gerais para o estado estacionário do sistema efetivo. Para isso, basta tomarmos o limite de  $t \rightarrow \infty$  nestas equações.

Logo,

$$\tilde{\rho}_{gg}(t \rightarrow \infty) = \frac{\gamma}{\gamma + \gamma_+}, \quad \tilde{\rho}_{ee}(t \rightarrow \infty) = \frac{\gamma_+}{\gamma + \gamma_+}, \quad \tilde{\rho}_{ge}(t \rightarrow \infty) = 0. \quad (3.43)$$

Note que, quando o sistema efetivo atinge o estado estacionário não há coerência e o estado final equivale ao de um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório efetivo definido por uma temperatura  $T_{eff} > 0$  dada por

$$\frac{\tilde{\rho}_{ee}}{\tilde{\rho}_{gg}} = \frac{\gamma_+}{\gamma} = e^{\frac{-\hbar\omega_e}{k_B T_{eff}}}. \quad (3.44)$$

Com os resultados obtidos até aqui podemos estudar a dinâmica do sistema nos estados estacionário e transiente, tanto no caso geral quanto no limite em que podemos eliminar adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  e ficamos com sistema efetivo de dois níveis. A seguir, vamos substituir o campo clássico por um campo quântico e vamos estudar a dinâmica do sistema nesse novo cenário.

## 3.2 Modelo Quântico

Na seção anterior utilizamos um modelo semiclássico para estudar a dinâmica de um sistema quântico aberto. Nessa seção vamos substituir o campo clássico por um campo quântico e utilizaremos uma configuração semelhante à que foi utilizada anteriormente para estudar a dinâmica do sistema que surge nesse novo cenário.

### 3.2.1 Caso Geral

Para estudar a dinâmica do sistema num modelo completamente quântico utilizaremos a seguinte configuração:

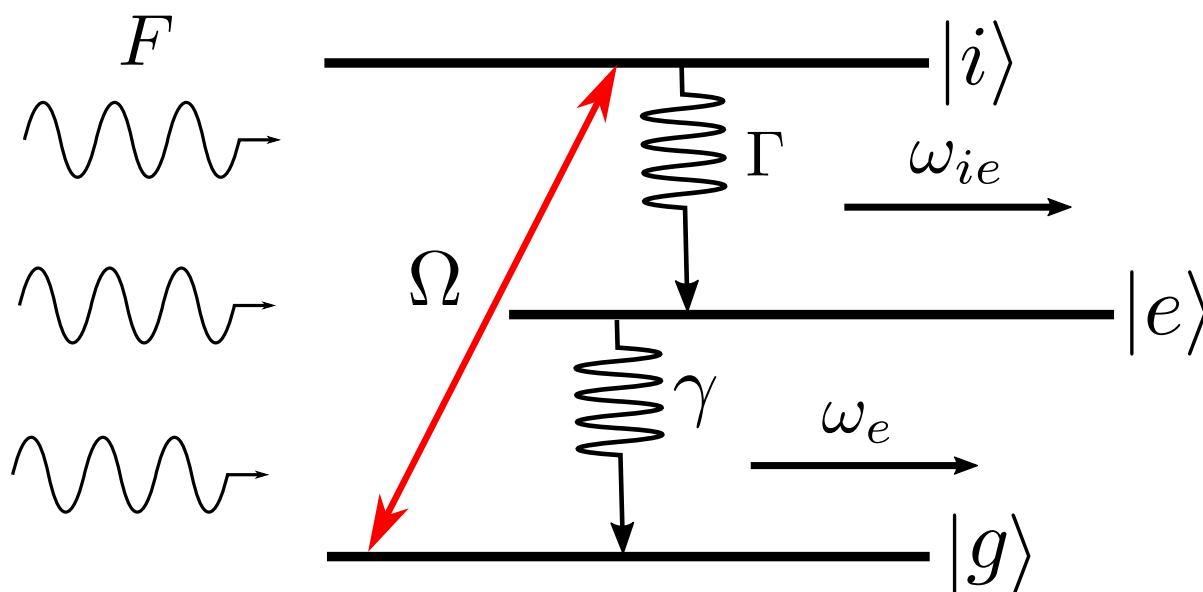


Figura 3.3: A figura mostra sistema quântico de três níveis agora acoplado a um modo de um campo eletromagnético quantizado que conecta os níveis  $|g\rangle$  e  $|i\rangle$  com uma frequência de Rabi no vácuo  $\Omega$  e também a dois reservatórios independentes a temperatura zero com taxas de dissipação  $\Gamma$  e  $\gamma$ . A transição do nível  $|i\rangle$  para o nível  $|e\rangle$  (respectivamente,  $|e\rangle$  para  $|g\rangle$ ) está associada a emissão de um fóton com energia  $\omega_{ie}$  ( $\omega_e$ ). O campo quântico externo  $F$  transfere energia para o campo acoplado ao sistema.

Nesse novo cenário o sistema será composto por três níveis discretos (atômicos) acoplados a um campo quantizado ressonante à transição  $|g\rangle \rightarrow |i\rangle$  que, por sua vez, é dirigido externamente por uma força  $F$ . o sub-sistema de três níveis decai espontaneamente em cascata, emitindo para dois reservatórios térmicos independentes à temperatura zero. A



primeira consequência da quantização do campo é que agora temos um sistema bipartido e isso afeta o tamanho do espaço de Hilbert com o qual vamos trabalhar, podendo deixar o problema extremamente complicado de ser resolvido.

A hamiltoniana do sistema nesse novo modelo é dada por

$$H_S(t) = \omega_i |i\rangle \langle i| + \omega_e |e\rangle \langle e| + \omega_i a^\dagger a + \Omega(|g\rangle \langle i| a^\dagger + |i\rangle \langle g| a) + F(ae^{i\omega_i t} + a^\dagger e^{-i\omega_i t}). \quad (3.45)$$

Reescrevendo  $H_S(t)$  em termos de uma hamiltoniana livre  $H_0$  e de uma hamiltonia de interação  $V(t)$ , obtemos

$$H_S(t) = H_0 + V(t) \quad (3.46)$$

$$H_0 = \omega_i |i\rangle \langle i| + \omega_e |e\rangle \langle e| + \omega_i a^\dagger a \quad (3.47)$$

$$V(t) = \Omega(|g\rangle \langle i| a^\dagger + |i\rangle \langle g| a) + F(ae^{i\omega_i t} + a^\dagger e^{-i\omega_i t}). \quad (3.48)$$

Note que, os primeiros quatro termos de (3.45) formam a hamiltoniana do modelo de Jaynes-Cummings, quando assumimos que o estado fundamental possui energia igual a zero. Assim como no modelo semiclássico, a dinâmica desse novo modelo é descrita, no quadro de interação, pela equação (3.2), com

$$V = \Omega(|g\rangle \langle i| a^\dagger + |i\rangle \langle g| a) + F(a + a^\dagger). \quad (3.49)$$

Neste mesmo ponto na seção anterior, utilizamos a equação (3.2) e a base de autoestados de  $H_0$  para aquele modelo e obtivemos um conjunto finito de equações diferenciais acopladas que nos permitia obter as soluções para o problema sob certas condições. Porém, nesse novo modelo, a base de autoestados de  $H_0$  é infinita, logo temos que lidar com um conjunto infinito de equações diferenciais acopladas, o que é impossível. Contudo, é possível obter uma expressão geral para obter as equações diferenciais na base de autoestados de

$H_0$ . Assim, por (3.2), obtemos

$$\begin{aligned}
\dot{\tilde{\rho}}_{nm}^{jk} = & -i [\Omega(\sqrt{n}\tilde{\rho}_{(n-1)m}^{ik} + \sqrt{n+1}\tilde{\rho}_{(n+1)m}^{gk} \delta_{ji} - \sqrt{m}\tilde{\rho}_{n(m-1)}^{ji} \delta_{kg} - \sqrt{m+1}\tilde{\rho}_{n(m+1)}^{jg} \delta_{ik}) \\
& + F(\sqrt{n}\tilde{\rho}_{(n-1)m}^{jk} + \sqrt{n+1}\tilde{\rho}_{(n+1)m}^{jk} - \sqrt{m}\tilde{\rho}_{n(m-1)}^{jk} - \sqrt{m+1}\tilde{\rho}_{n(m+1)}^{jk})] \\
& + \frac{\gamma}{2}(2\tilde{\rho}_{nm}^{ee} \delta_{jg} \delta_{kg} - \tilde{\rho}_{nm}^{je} \delta_{ke} - \tilde{\rho}_{nm}^{ek} \delta_{je}) \\
& + \frac{\Gamma}{2}(2\tilde{\rho}_{nm}^{ii} \delta_{je} \delta_{ke} - \tilde{\rho}_{nm}^{ji} \delta_{ki} - \tilde{\rho}_{nm}^{ik} \delta_{ji}). \tag{3.50}
\end{aligned}$$

Onde,  $\tilde{\rho}_{nm}^{jk} = {}_C \langle n | \otimes {}_S \langle j | \tilde{\rho}_S(t) | k \rangle_S \otimes | m \rangle_C$ , com  $S$  indicando o estado do sistema de três níveis e  $C$  indicando o estado do campo.

Para simplificar o problema e conseguirmos soluções, escolhemos trabalhar num limite em que podemos considerar que temos no máximo duas excitações no sistema total, de modo que o campo tenha no máximo uma excitação. Para isso, resolvemos o problema numericamente truncando o número de fótons no campo em  $n = 2$  e procuramos por combinações de  $F$ ,  $\Omega$ ,  $\gamma$  e  $\Gamma$  que possibilitam excluir estados que tenham mais do que duas excitações e estados com duas excitações no campo. Essa condição é satisfeita quando, por exemplo, escolhemos  $\Gamma/F = 15 \cdot 10^3$ ,  $\gamma/F = 100$ ,  $\Omega/F = 3 \cdot 10^3$ .

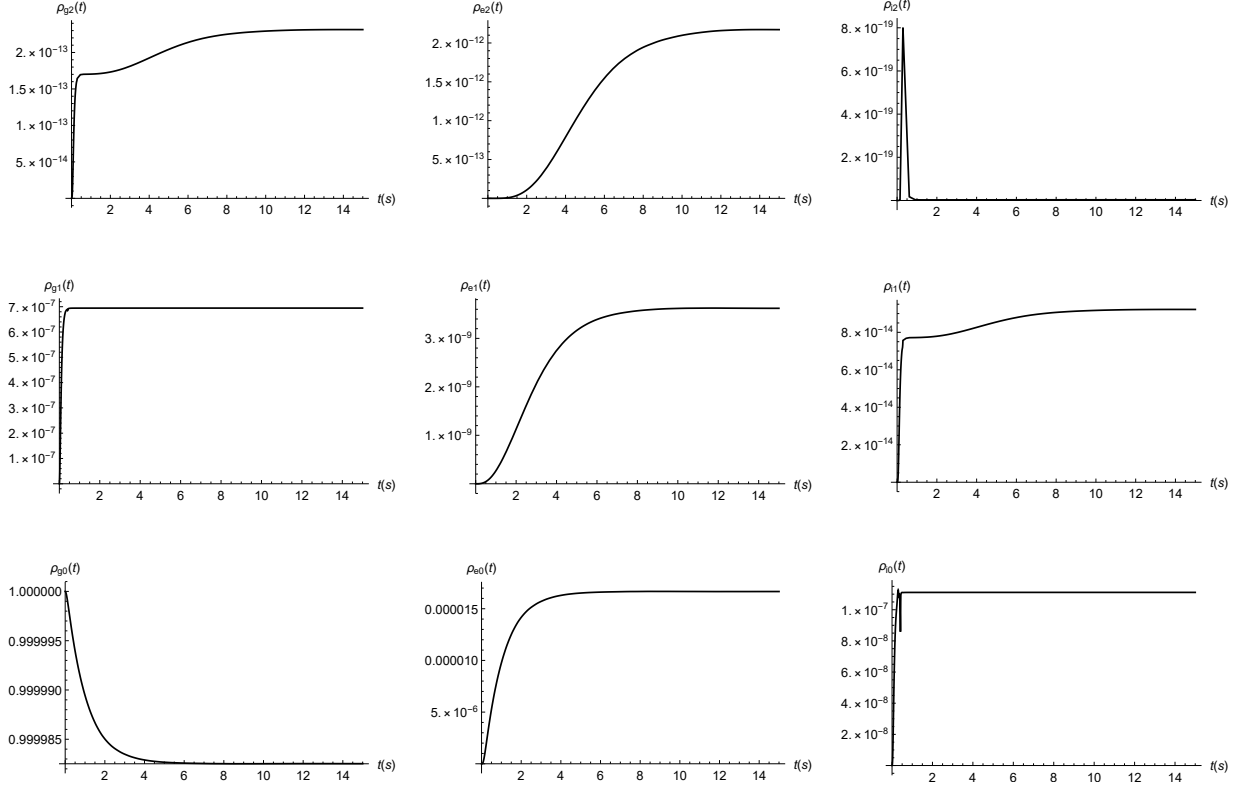


Figura 3.4: Estes gráficos representam as populações do sistema total com  $n = 2$ , onde  $n$  é o número de fótons, e para  $\Gamma/F = 15.10^3$ ,  $\gamma/F = 100$ ,  $\Omega/F = 3.10^3$ . Utilizamos como condição inicial  $\tilde{\rho}_S(0) = |g\rangle\langle g|$ .

Pelo gráficos podemos ver que as probabilidades de termos mais de duas excitações no estado do sistema e de duas excitações no campo são muito menores do que um, logo podemos descartá-las. Assim, podemos efetivamente truncar nossa base em  $|g0\rangle$ ,  $|g1\rangle$ ,  $|e0\rangle$ ,  $|e1\rangle$ ,  $|i0\rangle$ . Utilizando essa base e (3.50), obtemos o seguinte conjunto de equações

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{gg} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{10}^{gg}) + \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.51)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{gg} = i\Omega\tilde{\rho}_{00}^{gi} + iF(\tilde{\rho}_{00}^{gg} - \tilde{\rho}_{11}^{gg})\gamma\tilde{\rho}_{01}^{ee} \quad (3.52)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ge} = iF(\tilde{\rho}_{10}^{ge} - \tilde{\rho}_{01}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ge} \quad (3.53)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{ge} = iF(\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \tilde{\rho}_{11}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{01}^{ge} \quad (3.54)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{gi} = i\Omega\tilde{\rho}_{01}^{gg} - iF\tilde{\rho}_{10}^{gi} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{gi} \quad (3.55)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{gg} = i\Omega(\tilde{\rho}_{10}^{gi} - \tilde{\rho}_{01}^{ig}) + iF(\tilde{\rho}_{10}^{gg} - \tilde{\rho}_{01}^{gg}) + \gamma\tilde{\rho}_{11}^{ee} \quad (3.56)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{10}^{ge} = i\Omega(\tilde{\rho}_{00}^{ie} + iF(\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \tilde{\rho}_{11}^{ge})) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{ge} \quad (3.57)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{ge} = i\Omega\tilde{\rho}_{01}^{ie} + iF(\tilde{\rho}_{10}^{ge} - \tilde{\rho}_{01}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{11}^{ge} \quad (3.58)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{10}^{gi} = i\Omega(\tilde{\rho}_{11}^{gg} - \tilde{\rho}_{00}^{ii}) - iF\tilde{\rho}_{00}^{gi} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{gi} \quad (3.59)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{ee} - \tilde{\rho}_{10}^{ee}) + \Gamma\tilde{\rho}_{00}^{ii} - \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.60)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{00}^{ee} - \tilde{\rho}_{11}^{ee}) - \gamma\tilde{\rho}_{01}^{ee} \quad (3.61)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ei} = i\Omega\tilde{\rho}_{01}^{eg} - iF\tilde{\rho}_{10}^{ei} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ei} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ei} \quad (3.62)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{10}^{ee} - \tilde{\rho}_{01}^{ee}) - \gamma\tilde{\rho}_{11}^{ee} \quad (3.63)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{10}^{ei} = i\Omega\tilde{\rho}_{11}^{eg} - iF\tilde{\rho}_{00}^{ei} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{ei} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{ei} \quad (3.64)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ii} = -i\Omega(\tilde{\rho}_{10}^{gi} - \tilde{\rho}_{01}^{ig}) - \Gamma\tilde{\rho}_{00}^{ii} \quad (3.65)$$

Com este conjunto de equações podemos obter soluções numéricas para a dinâmica do sistema nos regimes estacionário e transiente, dentro do limite em que escolhemos trabalhar. Se estivermos interessados apenas no regime estacionário, podemos utilizar a condição de que no estado estacionário  $\dot{\tilde{\rho}}_{nm}^{jk} = 0$  nas equações (3.51 - 3.65), e assim obtemos um sistema de equações para a dinâmica do sistema no estado estacionário que nos fornece soluções analíticas. Logo, pelas equações (3.51 - 3.65), no estado estacionário, obtemos

$$\tilde{\rho}_{00}^{gg} = \frac{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) - 4F^2\gamma (2F^2 + \gamma(\gamma + \Gamma)) \Omega^2 + 4\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4}{2F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 16F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 4\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.66)$$

$$\tilde{\rho}_{01}^{gg} = \frac{iF\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Gamma\Omega^2}{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.67)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{gi} = \frac{2F^3\gamma (4F^2 + \gamma^2) \Omega - 2F\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^3}{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.68)$$

$$\tilde{\rho}_{11}^{gg} = \frac{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4\gamma\Omega^2}{2F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 16F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 4\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.69)$$

$$\tilde{\rho}_{10}^{gi} = \frac{iF^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) \Gamma\Omega}{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.70)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{ee} = \frac{2F^2 (2F^2 + \gamma^2) \Gamma\Omega^2}{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.71)$$

$$\tilde{\rho}_{01}^{ee} = \frac{2iF^3\gamma\Gamma\Omega^2}{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.72)$$

$$\tilde{\rho}_{11}^{ee} = \frac{4F^4\Gamma\Omega^2}{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.73)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{ii} = \frac{2F^2\gamma (4F^2 + \gamma^2) \Omega^2}{F^2 (4F^2\gamma + \gamma^3) (4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma (2F^2 + \gamma^2) \Omega^4} \quad (3.74)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{ge} = \tilde{\rho}_{01}^{ge} = \tilde{\rho}_{10}^{ge} = \tilde{\rho}_{11}^{ge} = \tilde{\rho}_{00}^{ei} = \tilde{\rho}_{10}^{gg} = 0. \quad (3.75)$$

Utilizando essas soluções podemos calcular o traço da matriz densidade

$$tr \{ \tilde{\rho}_S \} = \tilde{\rho}_{00}^{gg} + \tilde{\rho}_{11}^{gg} + \tilde{\rho}_{00}^{ee} + \tilde{\rho}_{11}^{ee} + \tilde{\rho}_{00}^{ii} = 1. \quad (3.76)$$

Com isso, verificamos que as equações (3.51 - 3.65), de fato, preservam o traço. Agora que obtivemos as equações que descrevem a dinâmica do sistema total neste limite, vamos proceder de maneira análoga ao que foi feito na primeira seção e olhar a dinâmica do sistema no limite da eliminação adiabática. Mas aqui faremos a eliminação adiabática em duas etapas. Na primeira etapa, vamos considerar  $\Gamma$  muito maior que as outras taxas e eliminaremos adiabaticamente o nível  $|i0\rangle$ . Na segunda etapa, vamos assumir certas condições para eliminar adiabaticamente os níveis  $|g1\rangle$  e  $|e1\rangle$  e ficaremos com um sistema efetivo de dois níveis, análogo ao da primeira seção.

### 3.2.2 Eliminação adiabática (Etapa 1)

Como no exemplo dado no capítulo 2, Vamos assumir nessa primeira etapa do processo de eliminação adiabática que  $\Gamma$  é muito maior do que as outras taxas. Assim, temos que

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{gg} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{10}^{gg}) + \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.77)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{gg} = i\Omega\tilde{\rho}_{00}^{gi} + iF(\tilde{\rho}_{00}^{gg} - \tilde{\rho}_{11}^{gg}) + \gamma\tilde{\rho}_{01}^{ee} \quad (3.78)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ge} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{ge} - \tilde{\rho}_{10}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ge} \quad (3.79)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{ge} = iF(\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \tilde{\rho}_{11}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{01}^{ge} \quad (3.80)$$

$$0 = i(\Omega\tilde{\rho}_{01}^{gg} - iF\tilde{\rho}_{10}^{gi}) - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{gi} \quad (3.81)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{gg} = i\Omega(\tilde{\rho}_{10}^{gi} - \tilde{\rho}_{01}^{ig}) + iF(\tilde{\rho}_{10}^{gg} - \tilde{\rho}_{01}^{gg}) + \gamma\tilde{\rho}_{11}^{ee} \quad (3.82)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{10}^{ge} = i\Omega(\tilde{\rho}_{00}^{ie} + iF(\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \tilde{\rho}_{11}^{ge})) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{ge} \quad (3.83)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{ge} = i\Omega\tilde{\rho}_{01}^{ie} + iF(\tilde{\rho}_{10}^{ge} - \tilde{\rho}_{01}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{11}^{ge} \quad (3.84)$$

$$0 = i\Omega(\tilde{\rho}_{11}^{gg} - \tilde{\rho}_{00}^{ii}) - iF\tilde{\rho}_{00}^{gi} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{gi} \quad (3.85)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{ee} - \tilde{\rho}_{10}^{ee}) + \Gamma\tilde{\rho}_{00}^{ii} - \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.86)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{00}^{ee} - \tilde{\rho}_{11}^{ee}) - \gamma\tilde{\rho}_{01}^{ee} \quad (3.87)$$

$$0 = i\Omega\tilde{\rho}_{01}^{eg} - iF\tilde{\rho}_{10}^{ei} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ei} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ei} \quad (3.88)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{10}^{ee} - \tilde{\rho}_{01}^{ee}) - \gamma\tilde{\rho}_{11}^{ee} \quad (3.89)$$

$$0 = i\Omega\tilde{\rho}_{11}^{eg} - iF\tilde{\rho}_{00}^{ei} - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{ei} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{ei} \quad (3.90)$$

$$0 = -i\Omega(\tilde{\rho}_{10}^{gi} - \tilde{\rho}_{01}^{ig}) - \Gamma\tilde{\rho}_{00}^{ii}. \quad (3.91)$$

Agora, utilizando as equações (3.81), (3.85), (3.88), (3.90), (3.91) e suas conjugadas complexas, obtemos as seguintes relações

$$\tilde{\rho}_{00}^{gi} = \frac{2\Omega i}{\Gamma}\tilde{\rho}_{01}^{gg} \quad (3.92)$$

$$\tilde{\rho}_{10}^{gi} = \frac{2\Omega i}{\Gamma}\tilde{\rho}_{11}^{gg} \quad (3.93)$$

$$\Gamma \tilde{\rho}_{00}^{ii} = \frac{4\Omega^2}{\Gamma} \tilde{\rho}_{11}^{gg} \quad (3.94)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{ei} = \frac{2\Omega i}{\Gamma} \tilde{\rho}_{01}^{eg} \quad (3.95)$$

$$\tilde{\rho}_{10}^{ei} = \frac{2\Omega i}{\Gamma} \tilde{\rho}_{11}^{eg}. \quad (3.96)$$

Substituindo estes resultados nas equações diferenciais, obtemos um sistema efetivo formado pelos níveis  $|g0\rangle$ ,  $|g1\rangle$ ,  $|e0\rangle$  e  $|e1\rangle$  cuja dinâmica é descrita pelas equações

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{gg} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{10}^{gg}) + \gamma \tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.97)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{gg} = -\frac{\gamma_+}{2} \tilde{\rho}_{01}^{gg} + iF(\tilde{\rho}_{00}^{gg} - \tilde{\rho}_{11}^{gg}) + \gamma \tilde{\rho}_{01}^{ee} \quad (3.98)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ge} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{ge} - \tilde{\rho}_{10}^{ge}) - \frac{\gamma}{2} \tilde{\rho}_{00}^{ge} \quad (3.99)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{ge} = iF(\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \tilde{\rho}_{11}^{ge}) - \frac{\gamma}{2} \tilde{\rho}_{01}^{ge} \quad (3.100)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{gg} = -\gamma_+ \tilde{\rho}_{11}^{gg} + iF(\tilde{\rho}_{10}^{gg} - \tilde{\rho}_{01}^{gg}) + \gamma \tilde{\rho}_{11}^{ee} \quad (3.101)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{10}^{ge} = -\frac{\gamma_+}{2} \tilde{\rho}_{10}^{ge} - iF(\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \tilde{\rho}_{11}^{ge}) - \frac{\gamma}{2} \tilde{\rho}_{10}^{ge} \quad (3.102)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{ge} = -\frac{\gamma_+}{2} \tilde{\rho}_{11}^{ge} + iF(\tilde{\rho}_{10}^{ge} - \tilde{\rho}_{01}^{ge}) - \frac{\gamma}{2} \tilde{\rho}_{11}^{ge} \quad (3.103)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{ee} - \tilde{\rho}_{10}^{ee}) + \gamma_+ \tilde{\rho}_{11}^{gg} - \gamma \tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.104)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{01}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{00}^{ee} - \tilde{\rho}_{11}^{ee}) - \gamma \tilde{\rho}_{01}^{ee} \quad (3.105)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{10}^{ee} - \tilde{\rho}_{01}^{ee}) - \gamma \tilde{\rho}_{11}^{ee} \quad (3.106)$$

onde,  $\gamma_+ := \frac{4\Omega^2}{\Gamma}$ . Com o nível  $|i0\rangle$  eliminado adiabaticamente, o sistema efetivo pode ser representado da seguinte forma

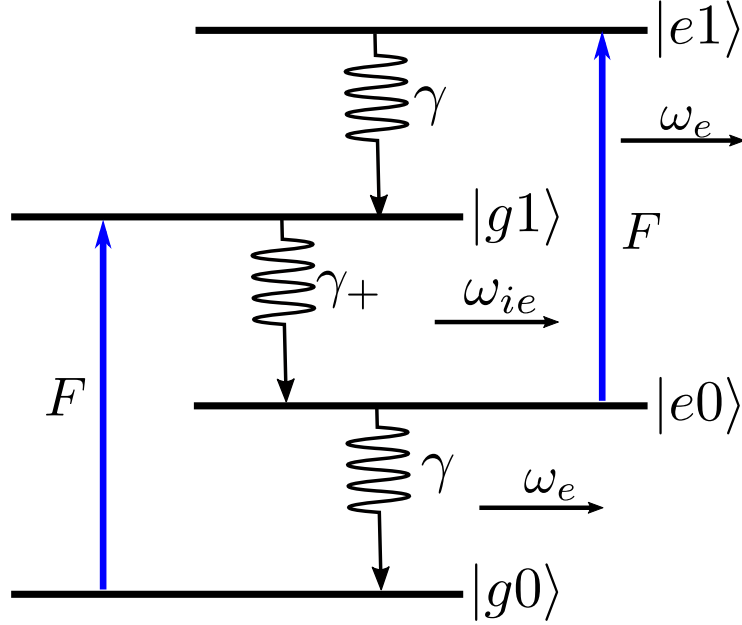


Figura 3.5: Essa figura ilustra a dinâmica efetiva do sistema após eliminarmos adiabaticamente o nível  $|i0\rangle$ . Nesse novo cenário temos um sistema efetivo de 4 níveis, onde o efeito do campo quântico caracterizado por  $\Omega$  é levar população de  $|g1\rangle$  para  $|e0\rangle$ .

Para esse sistema efetivo, a equação mestra no quadro de interação pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_S(t) = & -i[V', \tilde{\rho}_S(t)] + \frac{\gamma_+}{2} (2|e\rangle\langle g| a \tilde{\rho}_S(t)|g\rangle\langle e| a^\dagger - |g\rangle\langle g| a^\dagger a \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t)|g\rangle\langle g| a^\dagger a) + \\ & + \frac{\gamma}{2} (2|g\rangle\langle e| \tilde{\rho}_S(t)|e\rangle\langle g| - |e\rangle\langle e| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t)|e\rangle\langle e|) \end{aligned} \quad (3.107)$$

onde,  $V' = F(a + a^\dagger)$ . Mesmo eliminando adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  só conseguimos soluções numéricas para esse sistema de equações diferenciais no regime transiente. Porém, é possível obter soluções analíticas no estado estacionário.

Quando o Sistema atinge o estado estacionário, podemos proceder de maneira análoga ao caso geral e fazer  $\dot{\tilde{\rho}}_{nm}^{jk} = 0$  nas equações (3.97 - 3.106). Dessa forma, conseguimos soluções analíticas para a dinâmica do sistema

$$\tilde{\rho}_{00}^{gg} = \frac{\gamma (16F^4 + \gamma^2\gamma_+^2 + 2F^2 (2\gamma^2 - 2\gamma\gamma_+ + \gamma_+^2))}{\gamma^3\gamma_+^2 + 16F^4(2\gamma + \gamma_+) + 2F^2\gamma(4\gamma^2 + \gamma_+^2)} \quad (3.108)$$

$$\tilde{\rho}_{01}^{gg} = \frac{2iF (2F^2 + \gamma^2) \gamma_+}{\gamma^3\gamma_+^2 + 16F^4(2\gamma + \gamma_+) + 2F^2\gamma(4\gamma^2 + \gamma_+^2)} \quad (3.109)$$



$$\tilde{\rho}_{11}^{gg} = \frac{4F^2\gamma(4F^2 + \gamma^2)}{\gamma^3\gamma_+^2 + 16F^4(2\gamma + \gamma_+) + 2F^2\gamma(4\gamma^2 + \gamma_+^2)} \quad (3.110)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{ee} = \frac{4F^2(2F^2 + \gamma^2)\gamma_+}{\gamma^3\gamma_+^2 + 16F^4(2\gamma + \gamma_+) + 2F^2\gamma(4\gamma^2 + \gamma_+^2)} \quad (3.111)$$

$$\tilde{\rho}_{01}^{ee} = \frac{4iF^3\gamma\gamma_+}{\gamma^3\gamma_+^2 + 16F^4(2\gamma + \gamma_+) + 2F^2\gamma(4\gamma^2 + \gamma_+^2)} \quad (3.112)$$

$$\tilde{\rho}_{11}^{ee} = \frac{8F^4\gamma_+}{\gamma^3\gamma_+^2 + 16F^4(2\gamma + \gamma_+) + 2F^2\gamma(4\gamma^2 + \gamma_+^2)} \quad (3.113)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{ge} = \tilde{\rho}_{01}^{ge} = \tilde{\rho}_{10}^{ge} = \tilde{\rho}_{11}^{ge} = 0. \quad (3.114)$$

Como pode-se ver pelas equações, no estado estacionário não há coerência entre nos níveis  $|g\rangle$  e  $|e\rangle$ , mas há coerência para  $(|e0\rangle, |e1\rangle)$  e  $(|g0\rangle, |g1\rangle)$  devido ao campo  $F$  (veja a figura 3.5). Para as populações, vemos que elas verificam

$$tr\{\tilde{\rho}_S\} = \tilde{\rho}_{00}^{gg} + \tilde{\rho}_{11}^{gg} + \tilde{\rho}_{00}^{ee} + \tilde{\rho}_{11}^{ee} = 1. \quad (3.115)$$

Com isso, obtivemos equações que nos fornecem soluções numéricas para a dinâmica do sistema efetivo do regime transiente e conseguimos soluções analíticas para o regime estacionário. Agora, vamos para a segunda etapa do processo de eliminação adiabática. Nesta etapa, queremos eliminar adiabaticamente os níveis  $|g1\rangle$  e  $|e1\rangle$  para obter um sistema efetivo de dois níveis análogo ao que foi obtido eliminando adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  no modelo semiclássico. Para isso, devemos considerar  $\gamma$  e  $\gamma_+$  muito maiores do que  $F$ , pois assim tão logo apareça probabilidade em  $|e1\rangle$ ,  $\gamma$  leva o sistema para  $|g1\rangle$  que rapidamente o leva para  $|e0\rangle$ , fazendo com que o sistema efetivamente perca memória sobre os estados  $|e1\rangle$  e  $|g1\rangle$  e a dinâmica ocorra efetivamente entre os níveis  $|g0\rangle$  e  $|e0\rangle$ .

### 3.2.3 Eliminação adiabática (Etapa 2)

Definidas as condições para que se possa realizar essa segunda etapa do processo de eliminação adiabática, obtemos pelas equações (3.97 - 3.106)

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{gg} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{10}^{gg}) + \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.116)$$

$$0 = -\frac{\gamma_+}{2}\tilde{\rho}_{01}^{gg} + iF(\tilde{\rho}_{00}^{gg} - \tilde{\rho}_{11}^{gg}) + \gamma\tilde{\rho}_{01}^{ee} \quad (3.117)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ge} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{ge} - \tilde{\rho}_{10}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ge} \quad (3.118)$$

$$0 = iF(\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \tilde{\rho}_{11}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{01}^{ge} \quad (3.119)$$

$$0 = -\gamma_+\tilde{\rho}_{11}^{gg} + iF(\tilde{\rho}_{10}^{gg} - \tilde{\rho}_{01}^{gg}) + \gamma\tilde{\rho}_{11}^{ee} \quad (3.120)$$

$$0 = -\frac{\gamma_+}{2}\tilde{\rho}_{10}^{ge} - iF(\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \tilde{\rho}_{11}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{10}^{ge} \quad (3.121)$$

$$0 = -\frac{\gamma_+}{2}\tilde{\rho}_{11}^{ge} + iF(\tilde{\rho}_{10}^{ge} - \tilde{\rho}_{01}^{ge}) - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{11}^{ge} \quad (3.122)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ee} = iF(\tilde{\rho}_{01}^{ee} - \tilde{\rho}_{10}^{ee}) + \gamma_+\tilde{\rho}_{11}^{gg} - \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.123)$$

$$0 = iF(\tilde{\rho}_{00}^{ee} - \tilde{\rho}_{11}^{ee}) - \gamma\tilde{\rho}_{01}^{ee} \quad (3.124)$$

$$0 = iF(\tilde{\rho}_{10}^{ee} - \tilde{\rho}_{01}^{ee}) - \gamma\tilde{\rho}_{11}^{ee}. \quad (3.125)$$

Utilizando (3.117), (3.119), (3.120), (3.121), (3.122), (3.124) e (3.125) obtemos as seguintes relações

$$iF(\tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{10}^{gg}) = -\gamma_+\tilde{\rho}_{11}^{gg} + \frac{2F^2}{\gamma}\tilde{\rho}_{00}^{ee} = -p\tilde{\rho}_{00}^{gg} - p\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.126)$$

$$iF(\tilde{\rho}_{01}^{ee} - \tilde{\rho}_{10}^{ee}) = -\gamma\tilde{\rho}_{11}^{ee} = -\frac{2F^2}{\gamma}\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.127)$$

$$iF(\tilde{\rho}_{01}^{ge} - \tilde{\rho}_{10}^{ge}) = -\left(\frac{4F^2}{\gamma_+ + \gamma} + \frac{4F^2}{\gamma}\right)\tilde{\rho}_{00}^{ge} \quad (3.128)$$

Substituindo as respectivas equações acima em (3.116), (3.118) e (3.123), temos

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{gg} = -p\tilde{\rho}_{00}^{gg} + \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.129)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ge} = -\frac{p}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ge} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{00}^{ge} \quad (3.130)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{00}^{ee} = p\tilde{\rho}_{00}^{gg} - \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (3.131)$$

onde,  $p := \frac{4F^2}{\gamma_+}$ . Note que, essas equações têm a mesma forma que as equações obtidas para a dinâmica do sistema efetivo de dois níveis obtido na seção anterior. A equação mestra para esse sistema efetivo fica

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_S(t) = & \frac{p}{2} (2|e\rangle\langle g| \tilde{\rho}_S(t)|g\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t)|g\rangle\langle g|) \\ & + \frac{\gamma}{2} (2|g\rangle\langle e| \tilde{\rho}_S(t)|e\rangle\langle g| - |e\rangle\langle e| \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t)|e\rangle\langle e|). \end{aligned} \quad (3.132)$$

Após essa segunda etapa do processo de eliminação adiabática o sistema efetivo pode ser representado por

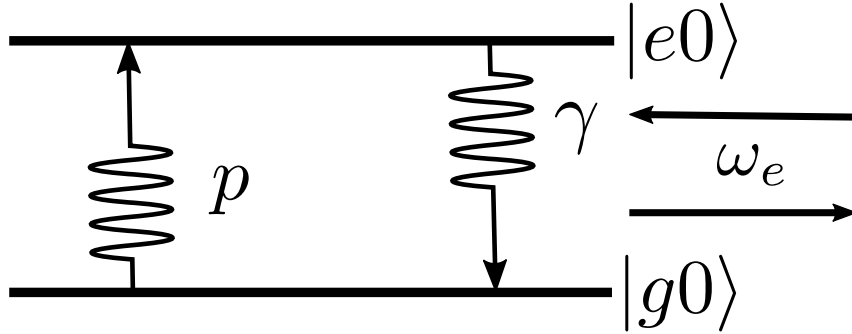


Figura 3.6: A figura representa o sistema efetivo após eliminarmos adiabaticamente os níveis  $|i0\rangle$ ,  $|g1\rangle$  e  $|e1\rangle$ . Note que, a configuração é a mesma que a obtido no modelo semiclássico ao eliminarmos adiabaticamente nível  $|i\rangle$

Para obter as soluções no estado estacionário e no estado transiente, podemos proceder de maneira análoga ao modelo semiclássico. Logo, para o estado transiente, temos

$$\tilde{\rho}_{00}^{gg}(t) = \frac{e^{-(p+\gamma)t}}{p+\gamma} (\gamma(e^{(p+\gamma)t} - 1) + \tilde{\rho}_{00}^{gg}(0)(p+\gamma)) \quad (3.133)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{ee}(t) = \frac{e^{-(p+\gamma)t}}{p+\gamma} (p(e^{(p+\gamma)t} - 1) + \tilde{\rho}_{00}^{ee}(0)(p+\gamma)) \quad (3.134)$$

$$\tilde{\rho}_{00}^{ge}(t) = \tilde{\rho}_{00}^{ge}(0) e^{-\frac{(p+\gamma)}{2}t}. \quad (3.135)$$

Note que, essas soluções são válidas para condições iniciais arbitrárias. Para analisarmos a dinâmica no estado estacionário, basta tomarmos o limite de  $t \rightarrow \infty$  nas equações acima. Então,

$$\tilde{\rho}_{00}^{gg}(t \rightarrow \infty) = \frac{\gamma}{\gamma+p}, \quad \tilde{\rho}_{00}^{ee}(t \rightarrow \infty) = \frac{p}{\gamma+p}, \quad \tilde{\rho}_{00}^{ge}(t \rightarrow \infty) = 0. \quad (3.136)$$

Analogamente ao que ocorreu para o sistema efetivo de dois níveis no modelo semiclássico, aqui também não há coerência quando o sistema atinge o estado estacionário e o estado final equivale ao de um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório efetivo definido por uma temperatura  $T'_{eff} > 0$  dada por

$$\frac{\tilde{\rho}_{00}^{ee}}{\tilde{\rho}_{00}^{gg}} = \frac{p}{\gamma} = e^{\frac{-\hbar\omega_e}{k_B T'_{eff}}}. \quad (3.137)$$

Com esses últimos resultados, temos um conjunto de equações que nos permite analisar a dinâmica do sistema em todos os casos de interesse tanto no regime transiente quanto no regime estacionário. E ainda, vimos que após a segunda etapa do processo de eliminação adiabática no modelo quântico recuperamos um sistema efetivo de dois níveis equivalente ao do modelo clássico.

# Capítulo 4

## Termodinâmica

No capítulo anterior, analisamos a dinâmica de dois sistemas quânticos abertos nos estados estacionário e transiente, tanto no caso geral quanto no limite de eliminação adiabática. Neste capítulo, vamos utilizar os resultados obtidos para a dinâmica desses sistemas para estudar a termodinâmica dos processos de troca de energia sob o ponto de vista da 1ª lei da termodinâmica para cada um dos casos estudados, seguindo a mesma ordem do capítulo 3.

### 4.1 Modelo Semiclássico

Nesta seção vamos analisar a termodinâmica dos processos de troca de energia utilizando o primeiro sistema apresentado no capítulo 3. Começaremos obtendo as expressões para fluxo de calor, produção de trabalho e fluxo de energia utilizando as definições dadas no capítulo 2 e os resultados obtidos para a dinâmica do sistema no caso geral. Em seguida, vamos obter novamente estas quantidades termodinâmicas para caso em que podemos eliminar adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  e obtemos um sistema efetivo de dois níveis.

#### 4.1.1 Caso geral

No capítulo 2 vimos como calcular o fluxo de calor e a produção de trabalho, sob certas condições, na termodinâmica quântica. Então, como o modelo em questão satisfaz as devidas condições, podemos utilizar (2.83), (2.84) e (2.49) para obtermos as expressões

gerais para essas quantidades termodinâmicas. A partir deste ponto não utilizaremos mais  $\hbar = 1$  e vamos definir  $E_i := \hbar\omega_i$  e  $E_e = \hbar\omega_e$ . Com isso, obtemos

$$\begin{aligned}\langle \dot{Q} \rangle &= \text{tr} \{ \dot{\rho}_S(t) H_S(t) \} \\ &= E_e \dot{\rho}_{ee} + E_i \dot{\rho}_{ii} + \hbar\Omega(\dot{\rho}_{gi} e^{-i\omega_i t} + \dot{\rho}_{ig} e^{i\omega_i t})\end{aligned}\quad (4.1)$$

$$\begin{aligned}\langle \dot{W} \rangle &= \left\{ \rho_S(t) \dot{H}_S(t) \right\} \\ &= i\Omega E_i (\rho_{ig} e^{i\omega_i t} - \rho_{gi} e^{-i\omega_i t}).\end{aligned}\quad (4.2)$$

Com essas equações podemos calcular a produção de trabalho e o fluxo de calor para os estados estacionário e transiente do sistema.

No capítulo 3 obtivemos as equações e as soluções para a dinâmica do sistema no quadro de interação. Então, para aproveitarmos essas equações e os resultados obtidos, podemos substituir  $\rho_S(t) = e^{-iH_0 t/\hbar} \tilde{\rho}_S(t) e^{iH_0 t/\hbar}$  em (4.1) e (4.2) e assim obtemos

$$\langle \dot{Q} \rangle = E_e \dot{\tilde{\rho}}_{ee} + E_i \dot{\tilde{\rho}}_{ii} + \hbar\Omega(\dot{\tilde{\rho}}_{gi} + \dot{\tilde{\rho}}_{ig}) + i\Omega E_i (\tilde{\rho}_{gi} - \tilde{\rho}_{ig}) \quad (4.3)$$

$$\langle \dot{W} \rangle = -i\Omega E_i (\tilde{\rho}_{gi} - \tilde{\rho}_{ig}). \quad (4.4)$$

Agora, utilizando (4.3), (4.4) e a 1ª lei da termodinâmica, podemos obter uma expressão geral para o fluxo de energia

$$\begin{aligned}\langle \dot{U} \rangle &= \langle \dot{Q} \rangle + \langle \dot{W} \rangle \\ &= E_e \dot{\tilde{\rho}}_{ee} + E_i \dot{\tilde{\rho}}_{ii} + \hbar\Omega(\dot{\tilde{\rho}}_{gi} + \dot{\tilde{\rho}}_{ig}).\end{aligned}\quad (4.5)$$

Substituindo (3.4), (3.5), (3.6) e a conjugada complexa de (3.6) em (4.3) e (4.5), obtemos

$$\langle \dot{Q} \rangle = \Gamma(E_e - E_i) \tilde{\rho}_{ii} - E_e \gamma \tilde{\rho}_{ee} - \frac{\gamma \hbar \Omega}{2} (\tilde{\rho}_{gi} + \tilde{\rho}_{ig}) \quad (4.6)$$

$$\langle \dot{U} \rangle = \Gamma(E_e - E_i) \tilde{\rho}_{ii} - E_e \gamma \tilde{\rho}_{ee} - \frac{\gamma \hbar \Omega}{2} (\tilde{\rho}_{gi} + \tilde{\rho}_{ig}) - i\Omega E_i (\tilde{\rho}_{gi} - \tilde{\rho}_{ig}). \quad (4.7)$$

Analogamente ao que fizemos no capítulo anterior, vamos começar obtendo as quantidades termodinâmicas no estado estacionário. Em seguida, vamos obtê-las no estado transiente utilizando os vínculos dados no capítulo 3.

Para obter as quantidades termodinâmicas no estado estacionário, basta substituímos (3.16), (3.17), (3.18) e a conjugada complexa de (3.18) em (4.4), (4.6) e (4.7). Com isso, obtemos

$$\langle \dot{U} \rangle = 0 \quad (4.8)$$

$$\langle \dot{W} \rangle = -\langle \dot{Q} \rangle = \frac{4\gamma\Gamma\Omega^2}{\gamma\Gamma^2 + 4(2\gamma + \Gamma)\Omega^2} E_i. \quad (4.9)$$

Pelos resultados acima pode-se ver que, independentemente dos valores das taxas, no estado estacionário não há variação da energia do sistema, pois o sistema perde calor com a mesma taxa com que é realizado trabalho sobre ele. Para analisarmos a termodinâmica no estado transiente precisamos das soluções encontradas para a dinâmica do sistema nesse regime.

Para obtermos as quantidades termodinâmicas no regime transiente, basta substituímos (3.23), (3.24), (3.25) e a conjugada complexa de (3.25) em (4.4), (4.6) e (4.7). Dessa forma, encontramos

$$\langle \dot{W} \rangle = E_i \Omega \frac{e^{-2\Omega t}}{2} (e^{2\Omega t} + (2i(\tilde{\rho}_{ig}(0) - \tilde{\rho}_{gi}(0)) - 1)\cos(2\Omega t) + (2(\tilde{\rho}_{gg}(0) - \tilde{\rho}_{ii}(0)) - 1)\sen(2\Omega t)) \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \langle \dot{Q} \rangle &= \Omega \frac{e^{-4\Omega t}}{2} (-2\hbar\Omega e^{2\Omega t} (\tilde{\rho}_{gi}(0) + \tilde{\rho}_{ig}(0)) + (2E_e - E_i)(6\tilde{\rho}_{ii}(0) + 2\tilde{\rho}_{gg}(0) - 1 + 2i(\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0)))) \\ &\quad - e^{4\Omega t} E_i + e^{2\Omega t} (((2i(\tilde{\rho}_{ig}(0) - \tilde{\rho}_{gi}(0)) - 1)E_e + (\tilde{\rho}_{gg}(0) - \tilde{\rho}_{ii}(0) + i(\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0))))E_i)\cos(2\Omega t) \\ &\quad + ((2(\tilde{\rho}_{gg}(0) - \tilde{\rho}_{ii}(0)) - 1)E_e + (1 + \tilde{\rho}_{ii}(0) - \tilde{\rho}_{gg}(0) + i(\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0))))E_i)\sen(2\Omega t)) \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \langle \dot{U} \rangle &= \Omega \frac{e^{-4\Omega t}}{2} ((2E_e - E_i)(6\tilde{\rho}_{ii}(0) + 2\tilde{\rho}_{gg}(0) - 1 + 2i(\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0)))) \\ &\quad + e^{2\Omega t} ((4i(\tilde{\rho}_{ig}(0) - \tilde{\rho}_{gi}(0)) - 2)E_e + (2(\tilde{\rho}_{gg}(0) - \tilde{\rho}_{ii}(0)) - 1)E_i)\cos(2\omega t) - e^{2\Omega t} (2\hbar\Omega \times \\ &\quad \times (\tilde{\rho}_{gi}(0) + \tilde{\rho}_{ig}(0)) - (2E_e(2(\tilde{\rho}_{gg}(0) - \tilde{\rho}_{ii}(0)) - 1) + E_i(1 + 2i(\tilde{\rho}_{gi}(0) - \tilde{\rho}_{ig}(0))))\sen(2\Omega t)). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Com estas equações podemos analisar a termodinâmica no regime transiente quando  $\Gamma/\Omega = 4$  e  $\gamma/\Omega = 2$ . Para ilustrar graficamente as soluções que podem ser obtidas através das equações acima, vamos assumir, por simplicidade, que inicialmente o estado

do sistema é  $\rho_S(0) = |g\rangle\langle g|$ . Dessa forma, obtemos

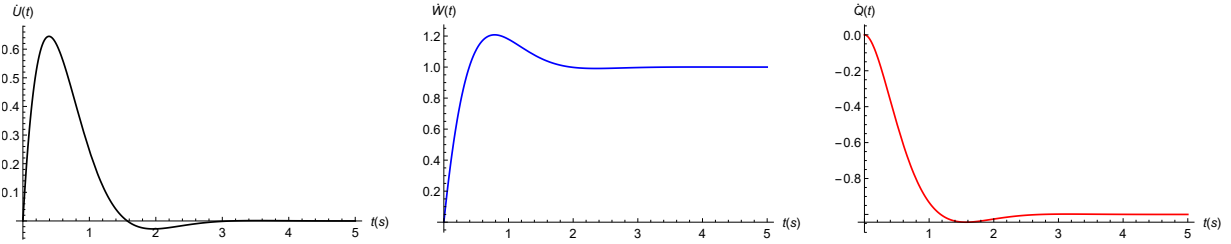


Figura 4.1: Estes gráficos representam as funções (4.10 - 4.12) quando assumimos que o estado inicial do sistema é  $\rho_S(0) = |g\rangle\langle g|$ .

Neste exemplo simples, vemos que inicialmente a energia interna aumenta, mas antes do sistema atingir o estado estacionário ele perde um pouco de energia. Como o fluxo de calor é negativo, então o sistema sempre fornece calor para os reservatórios, porém há sempre trabalho sendo realizado sobre o sistema. Note que, mesmo quando o sistema atinge o estado estacionário ainda há fluxo de calor e produção de trabalho a uma taxa constante.

Tomando o limite  $t \rightarrow \infty$  em (4.10 - 4.12), obtemos

$$\langle \dot{U} \rangle (t \rightarrow \infty) = 0, \quad \langle \dot{Q} \rangle (t \rightarrow \infty) = -\langle \dot{W} \rangle (t \rightarrow \infty) = -\frac{\Omega}{2} E_i. \quad (4.13)$$

Os resultados acima representam o fluxo de energia, o fluxo de calor e a produção de trabalho no estado estacionário. Note que, substituindo os vínculos associados às taxas em (4.8) e (4.9) chegamos nos mesmo resultados. Com isso, obtivemos as quantidades termodinâmicas para os estados estacionário e transiente do sistema.

Com os resultados obtidos até aqui podemos analisar a termodinâmica dos processos no caso geral tanto no estado transiente quanto no estado estacionário. Agora, vamos analisar a termodinâmica dos processos no limite da eliminação adiabática.

### 4.1.2 Eliminação adiabática

Para obter as quantidades termodinâmicas neste limite, vamos precisar das relações que foram obtidas no exemplo de bombeamento ótico dado no capítulo 2, para as coerências



$\tilde{\rho}_{gi}$  e  $\tilde{\rho}_{ig}$  e para a população  $\tilde{\rho}_{ii}$ . Substituindo (2.67) em (4.4), obtemos

$$\langle \dot{W} \rangle(t) = E_i \gamma_+ \tilde{\rho}_{gg}. \quad (4.14)$$

Pelas equações (2.62) e (2.66), temos

$$\Gamma \tilde{\rho}_{ii} = \frac{4\Omega^2}{\Gamma} \tilde{\rho}_{gg} \quad (4.15)$$

$$\tilde{\rho}_{ig} + \tilde{\rho}_{gi} = 0. \quad (4.16)$$

Substituindo estas equações em (4.6) e (4.7), obtemos

$$\langle \dot{Q} \rangle(t) = (E_e - E_i) \gamma_+ \tilde{\rho}_{gg} - E_e \gamma \tilde{\rho}_{ee} \quad (4.17)$$

$$\langle \dot{U} \rangle(t) = E_e (\gamma_+ \tilde{\rho}_{gg} - \gamma \tilde{\rho}_{ee}) \quad (4.18)$$

Note que, embora a dinâmica da eliminação adiabática nos indique que há apenas troca de calor com um reservatório efetivo de temperatura dada por  $\frac{\gamma_+}{\gamma}$ , a termodinâmica nos diz que ainda há trabalho sendo realizado sobre o sistema além da troca de calor. Ou seja, o que se percebe apenas como troca efetiva de calor é uma combinação de trabalho sendo realizado sobre o sistema e calor perdido para reservatórios de temperatura zero. Com essas expressões e as soluções obtidas no capítulo 3 para dinâmica do sistema no regime de eliminação adiabática, podemos obter as quantidades termodinâmicas nos estados estacionário e transiente do sistema.

Substituindo (3.41) e (3.42) e (4.14), (4.17) e (4.18), encontramos

$$\begin{aligned} \langle \dot{Q} \rangle &= (E_e - E_i) \gamma_+ \tilde{\rho}_{gg}(0) e^{-(\gamma_+ + \gamma)t} - E_e \gamma \tilde{\rho}_{ee}(0) e^{-(\gamma_+ + \gamma)t} \\ &\quad - E_i \gamma \gamma_+ \frac{e^{-(\gamma_+ + \gamma)t}}{\gamma_+ + \gamma} ((e^{(\gamma_+ + \gamma)t} - 1)) \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\langle \dot{W} \rangle = E_i \gamma_+ \frac{e^{-(\gamma_+ + \gamma)t}}{\gamma_+ + \gamma} (\gamma (e^{(\gamma_+ + \gamma)t} - 1) + \tilde{\rho}_{gg}(0) (\gamma_+ \gamma)) \quad (4.20)$$

$$\langle \dot{U} \rangle = E_e e^{-(\gamma_+ + \gamma)t} (\gamma_+ \tilde{\rho}_{gg}(0) - \gamma \tilde{\rho}_{ee}(0)). \quad (4.21)$$

Essas equações descrevem a termodinâmica no estado transiente do sistema efetivo de dois níveis. Para analisarmos a termodinâmica no estado estacionário, basta substituírmos

(3.43) em (4.14), (4.17) e (4.18). Logo,

$$\langle \dot{U} \rangle(t \rightarrow \infty) = 0, \quad \langle \dot{Q} \rangle(t \rightarrow \infty) = -\langle \dot{W} \rangle(t \rightarrow \infty) = -E_i \frac{\gamma_+ \gamma}{\gamma + \gamma_+}. \quad (4.22)$$

Note que, de fato, no estado estacionário, o balanço detalhado é satisfeito ( $\gamma_+ \tilde{\rho}_{gg} = \gamma \tilde{\rho}_{ee}$ ) e o calor trocado é igual ao trabalho realizado sobre o sistema. Com isso, a energia interna do sistema é constante no estado estacionário.

Nesta seção discutimos a termodinâmica do primeiro modelo apresentado no capítulo 3. A seguir, vamos analisar a termodinâmica do segundo modelo apresentado no capítulo anterior.

## 4.2 Modelo Quântico

Analisamos, agora, a termodinâmica dos processos do segundo modelo apresentado no capítulo 3. Como na seção anterior vamos começar obtendo as quantidades termodinâmica para o caso geral, que neste modelo é o primeiro caso para o qual apresentamos resultados para a dinâmica. Em seguida, vamos obter novamente estas quantidades para o caso em que eliminamos adiabaticamente o nível  $|i\rangle$ . Por fim, vamos analisar a termodinâmica para o caso em que temos um sistema efetivo de dois níveis.

### 4.2.1 Caso geral

No capítulo anterior vimos que não há como conseguir soluções para o caso mais geral possível, pois teríamos que lidar com um espaço de Hilbert infinito. Contudo, escrevemos uma expressão geral para as equações diferenciais na base de autoestados de  $H_0$ . Para as quantidades termodinâmicas de interesse isso também é possível, ou seja, conseguimos escrever uma expressão geral para cada uma delas a utilizando as definições dadas no

capítulo 2 e (3.54)

$$\begin{aligned} \langle \dot{Q} \rangle &= \sum_n E_i \dot{\tilde{\rho}}_{nn}^{ii} + \sum_n E_e \dot{\tilde{\rho}}_{nn}^{ee} + \sum_n \sum_j E_i \dot{\tilde{\rho}}_{nn}^{jj} + \sum_n \hbar\Omega(\sqrt{n+1} \dot{\tilde{\rho}}_{n(n+1)}^{ig} + \sqrt{n} \dot{\tilde{\rho}}_{n(n-1)}^{gi}) \\ &+ \sum_n \sum_j F(\hbar\sqrt{n} \dot{\tilde{\rho}}_{n(n-1)}^{jj} + \hbar\sqrt{n+1} \dot{\tilde{\rho}}_{n(n+1)}^{jj} + iE_i\sqrt{n+1} \tilde{\rho}_{n(n+1)}^{jj} - iE_i\sqrt{n} \tilde{\rho}_{n(n-1)}^{jj}) \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\langle \dot{W} \rangle = - \sum_n \sum_j iE_i F(\sqrt{n+1} \tilde{\rho}_{n(n+1)}^{jj} - \sqrt{n} \tilde{\rho}_{n(n-1)}^{jj}) \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \langle \dot{U} \rangle &= \sum_n E_i \dot{\tilde{\rho}}_{nn}^{ii} + \sum_n E_e \dot{\tilde{\rho}}_{nn}^{ee} + \sum_n \sum_j E_i \dot{\tilde{\rho}}_{nn}^{jj} + \sum_n \hbar\Omega(\sqrt{n+1} \dot{\tilde{\rho}}_{n(n+1)}^{ig} + \sqrt{n} \dot{\tilde{\rho}}_{n(n-1)}^{gi}) \\ &+ \sum_n \sum_j \hbar F(\sqrt{n} \dot{\tilde{\rho}}_{n(n-1)}^{jj} + \sqrt{n+1} \dot{\tilde{\rho}}_{n(n+1)}^{jj}). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Agora, vamos utilizar estas expressões gerais para escrever as quantidades termodinâmicas na nossa base efetiva  $|g0\rangle, |g1\rangle, |e0\rangle, |e1\rangle, |i0\rangle$ , e assim como na seção anterior vamos escrevê-las de forma que seja possível aproveitar as soluções obtidas para a dinâmica. Dessa forma, temos que

$$\begin{aligned} \langle \dot{U} \rangle &= \Gamma(E_e - E_i) \tilde{\rho}_{00}^{ii} - E_e \gamma (\tilde{\rho}_{00}^{ee} + \tilde{\rho}_{11}^{ee}) - \Gamma \frac{\hbar\Omega}{2} (\tilde{\rho}_{10}^{gi} + \tilde{\rho}_{01}^{ig}) \\ &+ iE_i F(\tilde{\rho}_{10}^{gg} + \tilde{\rho}_{10}^{ee} - \tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{01}^{ee}) \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\langle \dot{Q} \rangle = \Gamma(E_e - E_i) \tilde{\rho}_{00}^{ii} - E_e \gamma (\tilde{\rho}_{00}^{ee} + \tilde{\rho}_{11}^{ee}) - \Gamma \frac{\hbar\Omega}{2} (\tilde{\rho}_{10}^{gi} + \tilde{\rho}_{01}^{ig}) \quad (4.27)$$

$$\langle \dot{W} \rangle = iE_i F(\tilde{\rho}_{10}^{gg} + \tilde{\rho}_{10}^{ee} - \tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{01}^{ee}) \quad (4.28)$$

Com essas equações podemos analisar a termodinâmica do sistema no estado transiente e no estado estacionário utilizando as soluções obtidas para dinâmica. Para ilustrar as soluções dessas quantidades termodinâmicas no regime transiente, vamos utilizar os mesmos vínculos entre as taxas usados no exemplo dado na dinâmica do sistema para truncarmos a base efetiva e o mesmo estado inicial. Com isso, obtemos

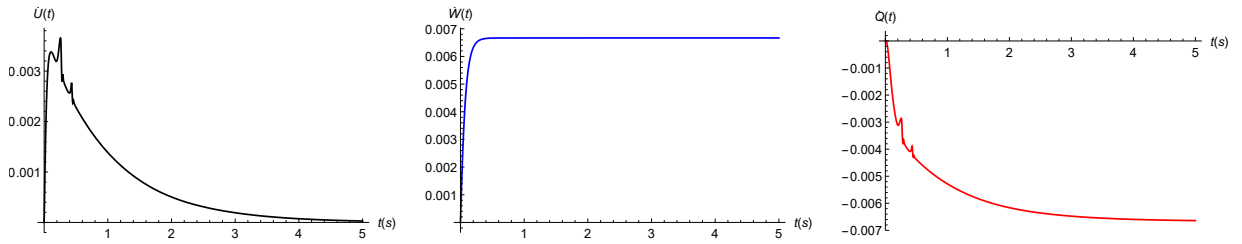


Figura 4.2: Estes gráficos representam as funções (4.26 - 4.28) quando assumimos que o estado inicial do sistema é  $\rho_S(0) = |g\rangle\langle g|$  e utilizando os vínculos entre as taxas que nos permite utilizar a nossa base efetiva.

Pelo gráfico acima vemos que a energia interna do sistema cresce até atingir um valor máximo no estado estacionário e o fluxo de calor e a produção de trabalho se comportam da mesma forma que a do exemplo dado no caso geral do modelo semiclássico.

Note que, analisar a termodinâmica no estado estacionário é muito mais simples, pois substituindo as soluções encontradas em (3.66 - 3.75) nas equações acima obtemos expressões analíticas para as quantidades termodinâmicas no regime estacionário, válidas para quaisquer valores de  $F$ ,  $\gamma$ ,  $\Gamma$  e  $\Omega$  que permitam a aproximação de truncar a base efetiva. Logo,

$$\langle \dot{Q} \rangle = - \frac{2F^2\gamma(4F^2 + \gamma^2)\Gamma\Omega^2 E_i}{F^2(4F^2\gamma + \gamma^3)(4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma(2F^2 + \gamma^2)\Omega^4} \quad (4.29)$$

$$\langle \dot{W} \rangle = \frac{2F^2\gamma(4F^2 + \gamma^2)\Gamma\Omega^2 E_i}{F^2(4F^2\gamma + \gamma^3)(4F^2 + \Gamma^2) + 8F^4(\gamma + \Gamma)\Omega^2 + 2\gamma(2F^2 + \gamma^2)\Omega^4} \quad (4.30)$$

$$\langle \dot{U} \rangle = 0 \quad (4.31)$$

Como pode-se ver, no estado estacionário não há variação da energia interna do sistema, pois a taxa com que trabalho é realizado sobre o sistema é igual à taxa com que o sistema perde calor para os reservatórios. Isso é o mesmo que ocorre com o caso geral do modelo semiclássico.

Com os resultados obtidos até aqui temos o necessário para analisar a termodinâmica dos processos de troca de energia do segundo modelo no caso geral quando é feita a aproximação que permite truncar a base efetiva. A seguir, vamos obter as quantidades termodinâmicas para a primeira etapa do processo de eliminação adiabática.

### 4.2.2 Eliminação adiabática (Etapa 1)

Nesta primeira etapa eliminamos adiabaticamente o nível  $|i0\rangle$  e obtivemos um sistema efetivo de quatro níveis, como mostrado na figura 3.5. Para obter as quantidades termodinâmicas nesse novo cenário, basta substituímos (3.94 - 3.96) em (4.26 - 4.28). Dessa forma, chegamos às seguintes equações

$$\langle \dot{U} \rangle(t) = \gamma_+(E_e - E_i)\tilde{\rho}_{11}^{gg} - E_e\gamma(\tilde{\rho}_{00}^{ee} + \tilde{\rho}_{11}^{ee}) + iE_iF(\tilde{\rho}_{10}^{gg} + \tilde{\rho}_{10}^{ee} - \tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{01}^{ee}) \quad (4.32)$$

$$\langle \dot{Q} \rangle(t) = \gamma_+(E_e - E_i)\tilde{\rho}_{11}^{gg} - E_e\gamma(\tilde{\rho}_{00}^{ee} + \tilde{\rho}_{11}^{ee}) \quad (4.33)$$

$$\langle \dot{W} \rangle(t) = iE_iF(\tilde{\rho}_{10}^{gg} + \tilde{\rho}_{10}^{ee} - \tilde{\rho}_{01}^{gg} - \tilde{\rho}_{01}^{ee}). \quad (4.34)$$

Com este conjunto de equações e com as soluções para a dinâmica do sistema podemos analisar a termodinâmica dos processos nos regimes transiente e estacionário desse sistema efetivo obtido após eliminarmos adiabaticamente o nível  $|i\rangle$ . Analogamente à seção anterior, podemos obter soluções analíticas para as quantidades termodinâmicas no regime estacionário utilizando as soluções obtidas no capítulo anterior para a dinâmica desse sistema efetivo também no regime estacionário. Assim, segue que

$$\langle \dot{Q} \rangle = -\frac{4F^2\gamma(4F^2 + \gamma^2)\gamma_+E_i}{\gamma^3\gamma_+^2 + 16F^4(2\gamma + \gamma_+) + 2F^2\gamma(4\gamma^2 + \gamma_+^2)} \quad (4.35)$$

$$\langle \dot{W} \rangle = \frac{4F^2\gamma(4F^2 + \gamma^2)\gamma_+E_i}{\gamma^3\gamma_+^2 + 16F^4(2\gamma + \gamma_+) + 2F^2\gamma(4\gamma^2 + \gamma_+^2)} \quad (4.36)$$

$$\langle \dot{U} \rangle = 0. \quad (4.37)$$

Como no caso geral, a energia interna do sistema é constante no estado estacionário, pois a taxa com que calor é cedido pelo sistema e trabalho realizado sobre ele é a mesma. Note que, eliminar o nível  $|i0\rangle$  aqui não nos leva ao mesmo cenário que a eliminação a adiabática do nível  $|i\rangle$  no modelo semiclássico.

A seguir, vamos analisar a termodinâmica do sistema após a realização da segunda etapa do processo de eliminação adiabática.

### 4.2.3 Eliminação adiabática (Etapa 2)

Nesta segunda etapa eliminamos adiabaticamente os níveis  $|e1\rangle$  e  $|g1\rangle$  e assim obtivemos um sistema efetivo de dois níveis similar ao do modelo semiclássico. Para obter as quantidades termodinâmicas aqui, vamos substituir (3.130 - 3.133) em (4.32 - 4.34). Assim, obtemos

$$\langle \dot{U} \rangle(t) = E_e(p\tilde{\rho}_{00}^{gg} - \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee}) \quad (4.38)$$

$$\langle \dot{Q} \rangle(t) = (E_e - E_i)\tilde{\rho}_{00}^{gg} - E_e\gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee} - E_i p\tilde{\rho}_{00}^{ee} - \frac{2F^2}{\gamma} E_i\tilde{\rho}_{00}^{ee} \quad (4.39)$$

$$\langle \dot{W} \rangle(t) = E_i p + \frac{2F^2}{\gamma} E_i\tilde{\rho}_{00}^{ee}. \quad (4.40)$$

Quando realizamos a segunda etapa da eliminação adiabática no capítulo 3, conseguimos expressões analíticas gerais para a dinâmica desse sistema efetivo tanto no estado estacionário quanto no estado transiente. Então, para obtermos as quantidades termodinâmicas no regime transiente, basta substituímos (3.137) e (3.138) em (4.38), (4.39) e (4.40)

$$\langle \dot{W} \rangle(t) = E_i p + 2E_i \frac{F^2 e^{-(p+\gamma)t}}{\gamma(p+\gamma)} [p(e^{(p+\gamma)t} - 1) + \tilde{\rho}_{00}^{ee}(0)(p+\gamma)] \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \langle \dot{Q} \rangle(t) &= E_e e^{-(p+\gamma)t} (p\tilde{\rho}_{00}^{gg}(0) + \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee}(0)) \\ &\quad - 2E_i \frac{F^2 e^{-(p+\gamma)t}}{\gamma(p+\gamma)} [p(e^{(p+\gamma)t} - 1) + \tilde{\rho}_{00}^{ee}(0)(p+\gamma)] \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$\langle \dot{U} \rangle(t) = E_e e^{-(p+\gamma)t} (p\tilde{\rho}_{00}^{gg}(0) - \gamma\tilde{\rho}_{00}^{ee}(0)). \quad (4.43)$$

Para obtermos as quantidades termodinâmica no regime estacionário, podemos tomar o limite de  $t \rightarrow \infty$  nas equações acima e assim obtemos

$$\langle \dot{W} \rangle = E_i p + 2E_i \frac{pF^2}{\gamma(p+\gamma)} \quad (4.44)$$

$$\langle \dot{Q} \rangle = -(E_i p + 2E_i \frac{pF^2}{\gamma(p+\gamma)}) \quad (4.45)$$

$$\langle \dot{U} \rangle = 0. \quad (4.46)$$

Note que, após eliminarmos adiabaticamente os níveis  $|g1\rangle$  e  $|e1\rangle$ , chegamos ao mesmo cenário do modelo semiclássico no regime de eliminação adiabática. Ou seja, com a

termodinâmica vemos que não apenas troca de calor com um reservatório efetivo de temperatura dada por  $\frac{p}{\gamma}$ , há também trabalho sendo realizado sobre o sistema. Assim, novamente o que se percebe apenas como troca efetiva de calor é resultado da realização de trabalho sobre o sistema e da perda de calor do sistema para o reservatório.

Com essas últimas equações temos um conjunto de resultados que nos permite analisar a termodinâmica de ambos os modelos apresentados, tanto no estado transiente quanto no estado estacionário para o caso geral ou no(s) regime(s) de eliminação adiabática.

## Capítulo 5

# Considerações Finais

Começamos este trabalho utilizando o modelo semiclássico apresentado na seção 3.1. Estudamos a dinâmica do sistema aberto no caso geral e no limite de eliminação adiabática, tanto no estado estacionário quanto no estado transiente. Vimos que para o caso geral, podemos obter soluções analíticas gerais para dinâmica do sistema no estado estacionário, mas para o estado transiente só conseguimos soluções analíticas impondo vínculos sobre  $\Gamma$ ,  $\gamma$  e  $\Omega$ . Na eliminação adiabática, conseguimos soluções analíticas gerais tanto para o estado estacionário quanto para o estado transiente. Vimos que nesse limite temos efetivamente um sistema de dois níveis interagindo com apenas um reservatório a uma temperatura efetiva  $T_{eff} > 0$  definida por (3.44) e que o papel do campo clássico é inverter população incoerentemente do nível  $|g\rangle$  para o nível  $|e\rangle$  a uma taxa  $\gamma_+$ . Conhecendo a dinâmica do sistema nos casos de interesse, o passo seguinte foi estudar a termodinâmica dos processos de troca de energia neste modelo.

Para analisarmos a termodinâmica de um ponto de vista energético no modelo semiclássico, utilizamos as equações (2.83 - 2.85) e todos os resultados obtidos para dinâmica do sistema. Dessa forma, conseguimos expressões que nos permitem analisar a termodinâmica nessa configuração para todos os casos de interesse, em diferentes condições, incluindo aquela que leva à formação do banho térmico.

Após analisarmos a dinâmica e a termodinâmica no modelo semiclássico, trocamos o campo clássico acoplado ao sistema de três níveis por um campo quântico e adiciona-



mos um campo externo  $F$ . Nesse novo cenário, vimos que o problema pode se tornar extremamente complicado de ser resolvido dependendo do tamanho do espaço de Hilbert, mas conseguimos expressões para dinâmica (3.54) e para termodinâmica (4.23 - 4.25) do sistema que são gerais, ou seja, não dependem do tamanho do espaço de Hilbert. Para simplificarmos um pouco o problema numa primeira abordagem, escolhemos trabalhar num limite em que efetivamente temos um sistema de cinco níveis. Mesmo com essa simplificação vimos que o problema ainda é complicado de ser resolvido.

Estudando a dinâmica desse novo sistema no caso geral, só conseguimos soluções para o estado transiente de forma numérica, mas para o estado estacionário conseguimos soluções analíticas gerais, dentro das condições impostas para trabalhar neste limite. Na primeira etapa do processo de eliminação adiabática, reduzimos nosso sistema de cinco níveis para um sistema efetivo de 4 níveis. Para este novo sistema efetivo, vimos que o papel do campo quântico acoplado ao sistema é transferir população incoerentemente do estado  $|g1\rangle$  para o estado  $|e0\rangle$  a uma taxa  $\gamma_+$  e que o papel do campo externo permanece inalterado. Aqui também conseguimos soluções analíticas para o estado estacionário, mas para o estado transiente só é possível obter soluções numericamente. Na segunda etapa do processo de eliminação adiabática, obtivemos um cenário equivalente ao que foi obtido na eliminação adiabática no modelo semiclássico, e dessa forma conseguimos resolver o problema analiticamente tanto no estado estacionário quanto no estado transiente. Nesta etapa conseguimos um sistema efetivo de dois níveis, onde o papel dos campos quânticos é levar populações de  $|g0\rangle$  para  $|e0\rangle$  de forma incoerente e que efetivamente está acoplado a apenas um reservatório a uma temperatura efetiva  $T'_{eff} > 0$  definida por (3.137).

Analogamente ao modelo semiclássico, após conhecermos a dinâmica do sistema nos casos de interesse, nosso passo seguinte foi analisar a termodinâmica. Para isto, utilizamos as equações (2.83 - 2.85) e todos os resultados obtidos para dinâmica. Aqui também conseguimos expressões gerais para o fluxo de calor, a produção de trabalho e o fluxo de energia. A partir dessas expressões e do conhecimento sobre a dinâmica do sistema que

estudamos, conseguimos obter as quantidades termodinâmicas nessa configuração, para todos os casos, e com elas podemos analisar a termodinâmica dos processos envolvendo troca de energia, sob quaisquer condições, incluindo a que nos leva a formação do banho térmico.

Em ambos os modelos e em todos os casos estudados em cada um, vimos que quando o sistema atinge o estado estacionário a energia interna fica constante, mas ainda há fluxo de calor e produção de trabalho. O fato de ainda termos os dois últimos processos ocorrendo, está diretamente ligado a existência de coerência no estado estacionário do sistema devido a atuação dos campos em ambos os modelos. Vimos também que com o modelo quântico estudado recuperamos um cenário equivalente ao obtido eliminando adiabaticamente o nível  $|i\rangle$  no modelo semiclássico, quando realizamos a segunda etapa do processo de eliminação adiabática. Nestes casos chegamos a condição que permite a produção de um banho térmico efetivo a uma temperatura  $T_{eff} > 0$ .

## Referências Bibliográficas

- [1] Christopher Gerry and Peter Knight, *Introductory Quantum Optics*, Cambridge University Press, 2004. 6, 7, 8
- [2] Rodney Loudon *The Quantum Theory of Light*, Oxford Science Publications, 2003.
- [3] Gilbert Grynberg, Alain Aspect and Claude Fabre, *Introduction to Quantum Optics: From the Semi-classical Approach to Quantized Light*, Cambridge University Press, 2004.
- [4] Stephen M. Barnett and Paul Radmore, *Methods in Theoretical Quantum Optics (Oxford Series in Optical and Imaging Sciences)*, Oxford Science Publications, 2002. 6, 7, 8, 16
- [5] R. Alicki, *The quantum open system as a model of the heat engine*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 12, L103 (1979).
- [6] H-P Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, 2007. 15, 24
- [7] Ángel Rivas and Susana F. Huelga, *Open Quantum Systems - An introduction*, Springer, Berlin, 1ª edição, 2012. 15
- [8] H. Carmichael, *An Open Systems Approach to Quantum Optics*, Springer, Berlin, 1993.
- [9] R.R. Purri, *Mathematical Methods of Quantum Optics*, Springer, Berlin, 2001. 7, 8

- [10] D.F Walls and G.J Milburn, *Quantum Optics (Springer Study Edition)*, Springer, Berlin, 1994. 6, 7, 16
- [11] Marlan O. Scully and M. Suhail Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press, 1997. 6
- [12] Miguel Orszag *Quantum Optics*, Springer, Berlin, 2008.
- [13] Pierre Meystre and Murray Sargent III *Elements of Quantum Optics*, Springer, Berlin, 2007.
- [14] Klaus Mølmer, Yvan Castin, Jean Dalibard, *Monte Carlo wave-function method in quantum optics*, Journal of the Optical Society of America B. 10 (3): 524. 21
- [15] C. Gardiner, P. Zoller, *Quantum Noise*, Springer, Berlin, 2004.
- [16] C. Gardiner, P. Zoller, *Quantum Noise in Quantum Optics: The Stochastic Schrödinger Equation*, Elsevier Science Publishers, 1997.
- [17] Cyril Elouard, David A Herrera-Martí, Maxime Clusel, Alexia Auffèves, *The role of quantum measurement in stochastic thermodynamics*, npj Quantum Inf., 3(1):9, 2017.
- [18] F. Tacchino, A. Auffèves, M.F. Santos, D. Gerace, *Steady State Entanglement beyond Thermal Limits*, Phys. Rev. Lett. 120, 063604, 2008.
- [19] Gavin E. Crooks, *Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences*, Phys. Rev. E 60, 2721, 1999. 2, 25
- [20] C. Jarzynski, *Nonequilibrium Equality for Free Energy Differences*, Phys. Rev. Lett. 78, 2690, 1997 2
- [21] Peter Talkner, Eric Lutz, Peter Hänggi, *Fluctuation theorems: Work is not an observable*, Phys. Rev. E 75, 050102(R), 2007

- [22] R. Kosloff, *Quantum Thermodynamics: A Dynamical Viewpoint*, Entropy 15, 2100, 2013.
- [23] John Goold, Marcus Huber, Arnau Riera, Lídia del Rio, Paul Skrzypczyk, *The role of quantum information in thermodynamics a topical review*, J. Phys. A Math. Theor.,49(14):143001, 2016.
- [24] Juliette Monsel, Cyril Elouard, Alexia Auffèves, *An autonomous quantum machine to measure the thermodynamic arrow of time*, npj Quantum Information volume 4: 59, 2018. 26
- [25] C. Elouard, N. K. Bernardes, A. R. R. Carvalho, M. F. Santos, A Auffèves, *Probing quantum fluctuation theorems in engineered reservoirs*, New J. Phys. 19 103011, 2017.
- [26] A. R. R. Carvalho, M. F. Santos, *Distant entanglement protected through artificially increased local temperature*, New J. Phys. 13 103010, 2011.
- [27] Janet Anders, Vittorio Giovannetti, *Thermodynamics of discrete quantum processes*, New J. Phys. 15 033022, 2013.
- [28] U. Seifert, *Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines*, Repts. Prog. Phys., 75 126001, 2012.
- [29] R. Alicki, R. Kosloff, *Introduction to Quantum Thermodynamics: History and Prospects*, arXiv:1801.08314, 2018.
- [30] E. Boukobza, D. J. Tannor, *Thermodynamics of bipartite systems: Application to light-matter interactions*, Phys. Rev. A 74, 063823, 2006.
- [31] S. Vinjanampathy, J. Anders, *Quantum thermodynamics*, arXiv:1508.06099, 2016.
- [32] U. Seifert, *Stochastic thermodynamics: principles and perspectives*, Eur. Phys. J. B 64, 423?431, 2008.

- [33] U. Seifert, *Entropy Production along a Stochastic Trajectory and an Integral Fluctuation Theorem*, Phys. Rev. Lett. 95, 040602, 2005. 26
- [34] Zongping Gong, H. T. Quan, *Jarzynski equality, Crooks fluctuation theorem, and the fluctuation theorems of heat for arbitrary initial states*, Phys. Rev. E 92, 012131, 2015
- [35] Elouard C., Mohammady M.H. (2018) Work, Heat and Entropy Production Along Quantum Trajectories. In: Binder F., Correa L., Gogolin C., Anders J., Adesso G. (eds) Thermodynamics in the Quantum Regime. Fundamental Theories of Physics, vol 195. Springer, Cham 26
- [36] Carlos Alexandre Brasil Felipe Fernandes Fanchini; Reginaldo de Jesus Napolitano, *A simple derivation of the Lindblad equation*, Rev. Bras. Ensino Fís. vol.35 no.1, 2013
- [37] G. Lindblad, *On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups*, Comm. Math. Phys., 48(119), 1976.
- [38] Raam Uzdin, Amikam Levy, Ronnie Kosloff, *Equivalence of Quantum Heat Machines, and Quantum-Thermodynamic Signatures*, Phys. Rev. X 5, 031044, 2015
- [39] Jochen Gemmer, M. Michel, Günter Mahler *Quantum Thermodynamics: Emergence of Thermodynamic Behavior Within Composite Quantum Systems*, Springer, Berlin, 2009.
- [40] K.Kraus, *States, effects, and operations: Fundamental notions of quantum theory*, Lecture notes in physics, Springer, Berlin, 1983.
- [41] ] M.A. Nielsen, I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, 2011.

- [42] R. Kosloff, A. Levy, *Quantum heat engines and refrigerators: Continuous devices*, Annual Review of Physical Chemistry 65, 365, 2014.
- [43] H.T. Quan, Y.-X. Liu, C.P. Sun, F. Nori, *Quantum Thermodynamic Cycles and Quantum Heat Engines*, Phys. Rev. E 76, 031105, 2007.
- [44] H. T. Quan, *Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. II.*, Phys. Rev. E 79, 041129, 2009.
- [45] Wellington L. Ribeiro, Gabriel T. Landi, and Fernando L. Semião, *Quantum thermodynamics and work fluctuations with applications to magnetic resonance*, American Journal of Physics 84, 948, 2016.
- [46] Pusz, W., Woronowicz, S.L. Commun.Math. Phys. (1978) 58: 273. 24