



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

DEMONIO DE MAXWELL AUTÓNOMO EN UN SISTEMA DE TRES PUNTOS CUÁNTICOS

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS, MENCIÓN EN FÍSICA

MAXIMILIANO BERNAL SANTIBAÑEZ

PROFESOR GUÍA:

Felipe Barra de la Guarda

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:

Alvaro Nuñez

Gonzalo Gutierrez

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por:

Fondecyt 1231210

SANTIAGO DE CHILE

2025

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR
AL TÍTULO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS,
MENCIÓN EN FÍSICA
POR: MAXIMILIANO BERNAL SANTIBAÑEZ
FECHA: 2025
PROF. GUÍA: FELIPE BARRA DE LA GUARDA

DEMONIO DE MAXWELL AUTÓNOMO EN UN SISTEMA DE TRES PUNTOS CUÁNTICOS

En esta tesis se estudian los flujos de información en un sistema compuesto por tres puntos cuánticos, denominados L , R y D , cada uno acoplado a un reservorio distinto. Se derivó una ecuación de tipo Lindblad semilocal para modelar la evolución del sistema, lo que permite incorporar efectos no seculares en la ecuación maestra. A partir de esta formulación, se simula numéricamente la dinámica bajo distintas condiciones iniciales y de acoplamiento, evaluando cantidades termodinámicas como el flujo de calor, la potencia y otros indicadores relevantes. El objetivo es identificar regímenes en los que el sistema actúe como un Demonio de Maxwell autónomo. Para caracterizar dicho comportamiento, se analiza el papel de la información en el proceso de transporte y cómo los flujos de información pueden verse afectados por el acoplamiento entre los sitios. Se demuestra que, para ciertas tasas de transición, el sistema exhibe un comportamiento coherente con el de un Demonio de Maxwell, siendo el flujo de información una fuente fundamental para la extracción de trabajo del sistema. Además, se calculan la concurrencia y la coherencia en el estado estacionario para distintos parámetros, encontrando que ambas alcanzan valores cercanos a sus máximos en la misma región en que los flujos de información asociados a los puntos L y R se vuelven idénticos. Por último, se construye un modelo semiclásico que considera únicamente las componentes diagonales de la matriz densidad, permitiendo comparar los flujos de información con el modelo plenamente cuántico. Se concluye que este último presenta una ventaja en la transferencia de información, lo que resalta el papel de las coherencias cuánticas como recurso termodinámico.

Para todos los que han formado parte de este camino.

Every second counts.

Agradecimientos

lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit.

Tabla de Contenido

Introducción	1
1. Sistemas cuánticos abiertos	3
1.1. Sistemas cuánticos cerrados	3
1.1.1. Cuadro de interacción	3
1.2. Ecuación de Lindblad	4
1.2.1. Dinámica de un sistema abierto	4
1.2.2. Ecuación maestra	5
1.3. Termodinámica de sistemas abiertos	8
1.3.1. Cantidades termodinámicas	8
1.3.2. Ley cero	8
1.3.3. Primera Ley	9
1.3.4. Segunda Ley	9
2. Ecuación de Lindblad con aproximación secular-parcial	10
2.1. Estadística de medición en dos puntos	10
2.2. Formalismo de superoperadores y espacio de Liouville	12
2.3. Ecuación maestra generalizada	13
2.3.1. Resolución finita de energía	14
2.3.2. Agrupación de frecuencias	15
2.4. Consistencia termodinámica	17
3. Flujos de información	19
3.1. Demonio de Maxwell	19
3.2. Demonio de Maxwell autónomo	21
3.3. Contexto clásico de los flujos de información	21
3.4. Segunda ley de la termodinámica y flujos de información	22
3.5. Contexto cuántico de los flujos de información	25
3.6. Flujos de información en sistemas cuánticos	27
4. Dinámica de un sistema de 3 puntos cuánticos conectado al ambiente	30
4.1. Puntos cuánticos	30
4.2. Modelo teórico	31
4.3. Ecuación maestra de un sistema de tres puntos cuánticos	32
4.3.1. Explicación del Demonio de Maxwell autónomo	33
4.4. Resultados	36
4.4.1. Estudio del transporte	36
4.4.2. Demonio de Maxwell en 3 puntos cuánticos	39

4.4.3. Comparación con caso clásico	48
Conclusiones	52
Bibliografía	53
Anexos	57
A. Cálculos realizados sección 2	57
A.1. Matriz de densidad en función del campo de conteo	57
A.2. Matriz de densidad generalizada	58
A.3. Funciones correlación	61
A.4. Ecuación de Lindblad generalizada	63
A.5. Condición KMS y funciones correlación espectral	64
A.6. Ley cero	65
A.7. Segunda Ley	66
B. Cálculos realizados sección 3	67
B.1. Producción de entropía y información	67
C. Cálculos realizados seccion 4	69
C.1. Funciones de correlación para un baño de fermiones libres	69
C.2. Operadores de salto de sistema de 3 puntos cuánticos	70
C.3. Agrupación de frecuencias para 2 puntos cuánticos	73
C.4. Aspecto Markoviano de las funciones correlación	76
C.5. Cálculo numérico para los tiempos de correlación	79
C.6. Concurrencia	84
C.7. Modelo clásico	85
C.8. Inverso de Drazin	88
C.9. Expresión para los flujos de información	88

Índice de Ilustraciones

3.1.	Esquema que representa al Demonio de Maxwell. En la primera etapa, ambos compartimientos contienen un gas ideal distribuido homogéneamente. Posteriormente, al permitir el paso selectivo de partículas, el compartimiento A queda enriquecido en partículas lentas (más frías) y el compartimiento B en partículas rápidas (más calientes). Figura adaptada de [42].	20
4.1.	Esquema de un punto cuántico definido electrostáticamente en una heteroestructura semiconductor. Los electrones quedan confinados en una región pequeña, dando lugar a niveles de energía discretos. Figura adaptada de [51].	31
4.2.	Esquema del sistema reducido compuesto por tres puntos cuánticos, modelados como tres niveles de energía. Estos niveles presentan interacción de Coulomb repulsiva entre sí y cada uno está acoplado a un baño térmico distinto.	31
4.3.	Primera etapa: los sitios D y R presentan una mayor probabilidad de estar ocupados. La ocupación se indica mediante círculos negros.	34
4.4.	Segunda etapa: el <i>hopping</i> g genera una superposición coherente entre los sitios L y R , indicada mediante círculos grises.	35
4.5.	Tercera etapa: el electrón se transporta preferentemente hacia el reservorio L	35
4.6.	Corriente de partículas en función de la razón eV/T . Las temperaturas de los reservorios son $T_L = T_R = T = 100$ y $T_D = 2$. El parámetro de acoplamiento se fija en $g = \frac{5}{1000}$. Las energías de sitio corresponden a $\epsilon = 0$ y $\epsilon_D = \mu_D - \frac{U}{2}$, con $\mu_D = 2$. Las interacciones de Coulomb se fijan en $U_f = 500$ y $U = 40$	36
4.7.	Potencia entregada por los reservorios en función de eV/T	37
4.8.	Flujo de calor recibido por los sistemas LR y D en función de eV/T	37
4.9.	Flujo de energía entregado por los reservorios en función de eV/T	38
4.10.	Coherencia (línea azul) y concurrencia (línea roja) en función de eV/T	39
4.11.	Elementos diagonales de la matriz densidad en función de eV/T	40
4.12.	(a) Flujos de calor liberados por cada reservorio α . (b) Flujos de corriente de partículas correspondientes a cada reservorio. Los resultados se obtuvieron considerando temperaturas $T = 100$ y $T_D = 2$, niveles de energía $\epsilon = 0$ y $\epsilon_D = \mu_D - U/2$ con potencial químico $\mu_D = 2$, tasas de túnel $\kappa_L = \kappa_R^U = 1/100$, $\kappa_R = \kappa_L^U = 1/600$, $\kappa_D = 1/50$, acoplamiento entre los sitios $g = 5/1000$ e interacciones de Coulomb $U = 40$ y $U_f = 500$	41
4.13.	Tasa de producción de entropía aparente del sistema $LR(\dot{\sigma}_{LR}^o)$ en función de eV/T	42
4.14.	Tasa de producción de entropía del sistema $LR(\dot{\sigma}_{LR})$ en función de eV/T	42
4.15.	Flujo de energía, tasa de cambio de energía libre, flujo de información, potencia y flujo de calor del sistema LR . (b) Flujo de energía, tasa de cambio de energía libre, flujo de información y potencia del Demonio.	43
4.16.	Flujos de información de cada sitio, L, R y D	44

4.17.	En línea azul la norma- l_1 de la coherencia \mathcal{C}_{l_1} y en línea roja la concurrencia \mathcal{C}_{on} .	45
4.18.	Cantidades termodinámicas para el sistema LR y el Demonio en función de g/κ_L , considerando $eV/T = 1$ y el resto de parámetros corresponden a los de la Figura 4.12.	46
4.19.	(a)Flujos de información de cada sitio. (b)Concurrencia y coherencia en función de g/κ_L	47
4.20.	Elementos diagonales ρ_{100} , ρ_{010} , ρ_{111} y ρ_{110} en función de eV/T . Donde el caso clásico corresponde a la línea roja y el caso cuántico a la línea azul.	49
4.21.	Elementos diagonales ρ_{101} , ρ_{000} , ρ_{011} y ρ_{001} en función de eV/T	49
4.22.	Corriente de partículas y flujos de información para el caso clásico(rojo) y cuántico(azul) en función de eV/T	51
C.1.	Tasas de túnel en función de las frecuencias ω	77
C.2.	(a)Parte real de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño L en función del tiempo.(b) Parte real de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño R en función del tiempo.	80
C.3.	(a)Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño L en función del tiempo.(b) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño R en función del tiempo.	81
C.4.	(a)Parte real de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño L en función del tiempo.(b) Parte real de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño R en función del tiempo.	81
C.5.	(a)Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño L en función del tiempo.(b) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño R en función del tiempo.	82
C.6.	Componentes ρ_{100} y ρ_{010} de la matriz densidad en función del tiempo, para distintos valores de eV/T	83

Introducción

Uno de los principales objetivos de la termodinámica contemporánea es esclarecer el carácter físico de la información. Este desafío fue anticipado por el célebre experimento mental propuesto por James Clerk Maxwell en 1871, el cual sugiere una aparente violación de la segunda ley de la termodinámica al introducir un "demonio" que manipula la dinámica de un gas ideal mediante información[1]. Esta paradoja motivó una profunda revisión conceptual, abordada en trabajos fundamentales de Szilard[2], Brillouin[3], Landauer[4] y Bennett[5], quienes formalizaron el vínculo entre información y entropía, sentando las bases de la termodinámica de la información.

Los avances experimentales en nanotecnología han permitido explorar sistemas de pocas partículas donde las fluctuaciones térmicas no pueden ser despreciadas[6, 7]. En este contexto, las formulaciones tradicionales de la termodinámica pierden validez, lo que exige un marco teórico más general. La termodinámica estocástica cumple este rol, al extender las leyes termodinámicas a regímenes fuera del equilibrio en sistemas clásicos de pequeña escala[8, 9].

Además del estudio de energía y entropía, resulta fundamental entender el rol de la información en estos sistemas. Se deben distinguir dos enfoques según el tipo de dinámica involucrada. El primero considera sistemas no autónomos, cuyo Hamiltoniano depende explícitamente del tiempo y es controlado por un agente externo. En estos casos, el demonio de Maxwell puede modelarse mediante procesos de medición y retroalimentación, como ha sido mostrado en diversos trabajos[10, 11]. El segundo enfoque aborda sistemas autónomos, de especial relevancia en contextos biológicos[12], donde el sistema evoluciona sin intervención externa bajo gradientes constantes de energía (como diferencias de potencial o temperatura). Aquí, la estructura bipartita del sistema permite identificar un subsistema que actúa como "demonio", acoplado al sistema de interés y modulando su dinámica dependiendo del estado en que se encuentre.

En ausencia de un agente externo, cuantificar el flujo de información entre el demonio y el sistema presenta una dificultad adicional, ya que no se dispone del resultado explícito de la medición ni del mecanismo de retroalimentación. Este desafío fue abordado por Horowitz y Esposito mediante el formalismo de la termodinámica estocástica[13], quienes propusieron una definición operacional del flujo de información en sistemas clásicos autónomos.

Posteriormente, Ptaszynski y Esposito extendieron este marco al contexto cuántico, cuantificando flujos de información en sistemas abiertos gobernados por dinámicas markovianas[14]. Para ello, emplearon una ecuación maestra de tipo Lindblad en su forma estándar (GKLS)[15–17], compatible con una descripción termodinámica consistente cuando se cumple la condición de balance detallado local. Este enfoque permite incorporar coherencias cuánticas —elementos no diagonales de la matriz densidad—, las cuales pueden servir como recursos termodinámicos[18, 19].

Sin embargo, una dificultad clave en la descripción cuántica es la elección de la base. Si se adopta una base global, como exige la aproximación secular, no siempre existe la posibilidad

de distinguir entre flujos locales de información, como se realiza en su contraparte clásica[13]. Por otro lado, una formulación en la base local puede revelar la estructura bipartita del sistema, pero ha sido criticada por posibles inconsistencias termodinámicas[20, 21].

Al aplicar una aproximación secular-parcial a la ecuación de Lindblad, Potts et al. [22] propusieron una ecuación maestra termodinámicamente consistente para sistemas abiertos. Dicha formulación se expresa en la base local e incorpora términos no seculares, lo que representa una mejora respecto al enfoque estrictamente secular.

Trabajos previos han empleado el formalismo desarrollado por Potts para analizar los efectos cuánticos en modelos compuestos por dos puntos cuánticos, cada uno acoplado a un reservorio distinto. Asimismo, se ha investigado cómo dichos efectos influyen en el transporte de partículas [23]. Por otro lado, el trabajo de Esposito y Horowitz investigó los flujos de información en un sistema clásico constituido por dos puntos cuánticos, donde uno de ellos está acoplado a dos reservorios y el otro a un único baño térmico. En dicho estudio, se demostró que el sistema actúa como un Demonio de Maxwell autónomo [13].

En este trabajo se estudia un Demonio de Maxwell autónomo en el régimen cuántico mediante la extensión del modelo de dos puntos cuánticos de [13] a un sistema de tres puntos cuánticos, denominados L , R y D . Para ello se emplea el formalismo de Potts, a partir del cual se deriva una ecuación de Lindblad semilocal que describe la evolución temporal del sistema. Cada punto cuántico está acoplado a un reservorio distinto. Uno de ellos desempeña el rol de Demonio de Maxwell, mientras que los otros dos conforman el subsistema físico LR .

En este subsistema se introducen interacciones adicionales que permiten explorar la dinámica cuántica, en particular el acoplamiento entre los dos puntos que lo constituyen. Las simulaciones numéricas de la ecuación de Lindblad permiten obtener los flujos de información y diversas magnitudes termodinámicas relevantes. Dichos resultados se calculan en un régimen donde emergen efectos cuánticos como la coherencia y el entrelazamiento entre los sitios que componen el subsistema LR .

Estas magnitudes —y en especial los flujos de información— permiten caracterizar el comportamiento del sistema como un Demonio de Maxwell autónomo. Finalmente, se construye un modelo semiclásico basado en el formalismo de Nakajima–Zwanzig [24], el cual considera únicamente las componentes diagonales de la matriz densidad. Este modelo permite comparar los flujos de información con los obtenidos en el tratamiento plenamente cuántico.

La tesis está estructurada de la siguiente manera: en el Capítulo 1 se introducen los conceptos fundamentales necesarios para describir la evolución de un sistema cuántico, ya sea como sistema cerrado —mediante la ecuación de Liouville— o como sistema abierto —a través de la ecuación de Lindblad en la aproximación secular. El Capítulo 2 está dedicado al desarrollo del Formalismo de Estadística de Conteo, el cual será empleado para derivar la ecuación de Lindblad termodinámicamente consistente propuesta por Potts. En el Capítulo 3 se introduce el concepto de flujo de información, discutiendo su influencia en la formulación de la segunda ley de la termodinámica tanto en contextos clásicos como cuánticos. Finalmente, en el Capítulo 4 se describe la dinámica del sistema compuesto por tres puntos cuánticos utilizando la ecuación de Lindblad derivada en esta tesis. Además, se analizan los resultados más relevantes obtenidos para dos configuraciones distintas del modelo.

Capítulo 1

Sistemas cuánticos abiertos

En este capítulo se presentan los conceptos fundamentales para describir la evolución de un sistema cuántico. Primero se aborda la dinámica unitaria de un sistema cerrado; luego se introduce la ecuación de Lindblad como una de las descripciones más utilizadas para sistemas abiertos bajo la aproximación secular; y finalmente se desarrolla una formulación general de la termodinámica de sistemas abiertos, donde el calor y el trabajo intercambiados con los reservorios permiten expresar las leyes de la termodinámica en términos de derivadas temporales de magnitudes físicas bien definidas, como la energía interna, el flujo de calor y la potencia.

La sección 1.1 se dedica a la evolución unitaria de sistemas cerrados. En la sección 1.2 se discute la ecuación de Lindblad y las aproximaciones necesarias para obtenerla, detalladas en la sección 1.2.2. Finalmente, en la sección 1.3 se presenta la termodinámica de sistemas abiertos, donde se definen rigurosamente el calor y el trabajo, y se establece su papel central en la formulación de las leyes de la termodinámica.

1.1. Sistemas cuánticos cerrados

Un sistema cuántico cerrado puede describirse mediante la matriz densidad $\hat{\rho}$. La evolución de esta matriz está gobernada por el Hamiltoniano del sistema, $\hat{H}(t)$, y en el cuadro de Schrödinger se expresa a través de la ecuación de Liouville–von Neumann ($\hbar = 1$) [17]:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = -i[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)].$$

La solución está dada por la evolución unitaria

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{T}_{\leftarrow} \exp \left[-i \int_{t_0}^t ds \hat{H}(s) \right] \quad \Longrightarrow \quad \hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0),$$

donde \hat{T}_{\leftarrow} representa el operador de ordenación temporal cronológica. Este operador organiza los productos de operadores dependientes del tiempo de manera que los instantes crecen de derecha a izquierda.

1.1.1. Cuadro de interacción

Supongamos que el Hamiltoniano del sistema puede separarse en dos partes:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_I(t).$$

En principio esta descomposición puede realizarse de distintas maneras. Sin embargo, en el caso de dos subsistemas, \hat{H}_0 corresponde a los Hamiltonianos de cada uno de ellos en ausencia de interacción, mientras que $\hat{H}_I(t)$ describe la interacción entre ambos.

Si introducimos los operadores unitarios

$$\hat{U}_0(t, t_0) \equiv \exp[-i\hat{H}_0(t - t_0)] \quad \hat{U}_I(t, t_0) \equiv \hat{U}_0^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0),$$

podemos describir la matriz densidad en el cuadro de interacción como

$$\hat{\rho}_I(t) \equiv \hat{U}_I(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}_I^\dagger(t, t_0).$$

La evolución en este cuadro está gobernada por la ecuación

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -i[\tilde{H}_I(t), \hat{\rho}_I(t)], \quad (1.1)$$

donde el Hamiltoniano de interacción transformado está dado por

$$\tilde{H}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{H}_I(t) \hat{U}_0(t, t_0).$$

1.2. Ecuación de Lindblad

En esta sección se presenta la derivación de la ecuación de Lindblad, la cual describe la evolución de un sistema cuántico abierto. En primer lugar, se introduce el concepto de sistema abierto y se define la matriz densidad reducida. Posteriormente, se deriva la ecuación maestra en la aproximación de Born–Markov y se presenta la forma estándar de la ecuación de Lindblad bajo la aproximación secular.

1.2.1. Dinámica de un sistema abierto

Un sistema abierto consiste en un sistema cuántico S , denominado sistema reducido, que está acoplado a un sistema B , denominado ambiente. Ambos constituyen subsistemas del sistema total $S + B$. Sea \mathcal{H}_S el espacio de Hilbert del sistema y \mathcal{H}_B el espacio de Hilbert del ambiente. Entonces, el espacio de Hilbert del sistema total $S + B$ se escribe como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$. El Hamiltoniano total está compuesto por el Hamiltoniano del sistema \hat{H}_S , el Hamiltoniano del ambiente \hat{H}_B y la interacción $\hat{H}_I(t)$:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_S \otimes \mathbf{I}_B + \mathbf{I}_S \otimes \hat{H}_B + \hat{H}_I(t). \quad (1.2)$$

Para utilizar la ecuación (1.2) es necesario separar el sistema en dos subsistemas, S y B , de modo que el espacio de Hilbert total pueda escribirse como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$. Sin embargo, en el caso de partículas idénticas como los fermiones, la identificación de estos dos subsistemas no es inmediata. Aun así, en el formalismo de segunda cuantización el sistema puede describirse mediante una base del espacio de Fock, lo que permite encontrar subsistemas en los cuales el espacio de Hilbert total se construye como un producto tensorial antisimétrico entre ellos [25, 26].

Los observables asociados al sistema S son de la forma $A \otimes \mathbf{I}_B$ y su valor de expectación

se calcula como

$$\langle A \rangle = \text{Tr}_S\{A\hat{\rho}_S\},$$

donde la matriz densidad reducida está dada por

$$\hat{\rho}_S = \text{Tr}_B\{\hat{\rho}\}.$$

Aquí, Tr_S denota la traza sobre el espacio de Hilbert del sistema y Tr_B la traza sobre el espacio del ambiente. El objeto principal de estudio es la matriz densidad reducida $\hat{\rho}_S$, cuya evolución será descrita mediante la ecuación de Lindblad.

1.2.2. Ecuación maestra

Sea un sistema cuántico S débilmente acoplado a un reservorio B , cuyo Hamiltoniano total está dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_I.$$

En el cuadro de interacción, la evolución del estado total se describe mediante

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = -i[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}_I(t)], \quad (1.3)$$

cuya forma integral es

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}(0) - i \int_0^t ds [\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_I(s)].$$

Reinsertando esta expresión en la ecuación (1.3) y tomando la traza sobre los grados de libertad del reservorio, se obtiene

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = -i \text{Tr}_B\{[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}(0)]\} - \int_0^t ds \text{Tr}_B\{[\hat{H}_I(t), [\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_I(s)]]\}. \quad (1.4)$$

A continuación se adoptan dos hipótesis estándar. En primer lugar,

$$\text{Tr}_B\{[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}(0)]\} = 0,$$

sin pérdida de generalidad [17]. En segundo lugar, se introduce la aproximación de Born: para acoplamiento débil, la influencia del sistema sobre el reservorio es despreciable, por lo que el estado del baño se asume constante en la ecuación (1.4) y el total se factoriza como

$$\hat{\rho}(t) \approx \hat{\rho}_S(t) \otimes \hat{\rho}_B.$$

Con esta suposición, la ecuación (1.4) toma la forma

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = - \int_0^t ds \text{Tr}_B\{[\hat{H}_I(t), [\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_{IS}(s) \otimes \hat{\rho}_B]]\}. \quad (1.5)$$

La ecuación anterior es no markoviana, pues depende del historial $\hat{\rho}_{IS}(s)$. Para obtener una descripción local en el tiempo se aplica la aproximación de Markov, de modo que la

evolución en el instante t depende únicamente de $\hat{\rho}_{IS}(t)$:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = - \int_0^t ds \text{Tr}_B\{[\hat{H}_I(t), [\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_{IS}(t) \otimes \hat{\rho}_B]]\}.$$

Esta expresión corresponde a la ecuación de Redfield. Mediante el cambio de variable $s \mapsto t - s$, se obtiene

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = - \int_0^t ds \text{Tr}_B\{[\hat{H}_I(t), [\hat{H}_I(t-s), \hat{\rho}_{IS}(t) \otimes \hat{\rho}_B]]\}. \quad (1.6)$$

Las funciones de correlación del reservorio decaen en una escala de tiempo característica τ_B , mientras que el sistema se relaja en una escala τ_R . La aproximación markoviana requiere $\tau_R \gg \tau_B$, lo que implica que el sistema no resuelve la dinámica del baño. En este régimen, el límite superior del integral en la ecuación (1.6) puede extenderse a ∞ , dado que el integrando se anula para tiempos largos:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = - \int_0^\infty ds \text{Tr}_B\{[\hat{H}_I(t), [\hat{H}_I(t-s), \hat{\rho}_{IS}(t) \otimes \hat{\rho}_B]]\}. \quad (1.7)$$

En el cuadro de Schrödinger, la interacción se escribe en la forma general

$$\hat{H}_I = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha},$$

donde $A_{\alpha} = A_{\alpha}^{\dagger}$ actúa en el espacio de Hilbert del sistema, mientras que $B_{\alpha} = B_{\alpha}^{\dagger}$ actúa en el del reservorio. Es conveniente descomponer A_{α} en la base de autoestados de \hat{H}_S . Si $\{\Pi(\epsilon) = |\epsilon\rangle\langle\epsilon|\}$ son los proyectores sobre autovalores ϵ , se definen los operadores

$$A_{\alpha}(\omega) \equiv \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \Pi(\epsilon'), \quad (1.8)$$

que cumplen

$$\sum_{\omega} A_{\alpha}(\omega) = A_{\alpha}, \quad [\hat{H}_S, A_{\alpha}(\omega)] = -\omega A_{\alpha}(\omega), \quad [\hat{H}_S, A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)] = \omega A_{\alpha}^{\dagger}(\omega).$$

Aplicando la identidad de Baker–Campbell–Hausdorff,

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2}[A, [A, B]] + \dots, \quad (1.9)$$

se obtiene en el cuadro de interacción

$$\hat{H}_I(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha}(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{i\omega t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \otimes B_{\alpha}^{\dagger}(t), \quad (1.10)$$

donde $B_{\alpha}(t) = e^{i\hat{H}_B t} B_{\alpha} e^{-i\hat{H}_B t}$.

Sustituyendo la ecuación (1.10) en la ecuación (1.7) y evaluando la traza parcial sobre el reservorio, aparecen las funciones de correlación espectrales, que en equilibrio son homogéneas en el tiempo:

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \text{Tr}_B\{B_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\beta}(t-s) \hat{\rho}_B\}.$$

Bajo esta definición, la evolución del sistema se escribe como

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) &= \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left(A_{\beta}(\omega) \hat{\rho}_{IS}(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') A_{\beta}(\omega) \hat{\rho}_{IS}(t) \right) \\ &+ \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{-i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) \left(A_{\alpha}(\omega') \hat{\rho}_{IS}(t) A_{\beta}^{\dagger}(\omega) - \hat{\rho}_{IS}(t) A_{\beta}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha}(\omega') \right). \end{aligned}$$

Sea $\tau_S = |\omega - \omega'|^{-1}$ la escala asociada a las oscilaciones entre frecuencias de Bohr. Si además se cumple $\tau_R \gg \tau_S$, los términos no seculares ($\omega \neq \omega'$) pueden despreciarse, ya que los factores altamente oscilantes $e^{\pm i(\omega - \omega')t}$ se promedian a cero en la escala τ_R . Esta es la llamada aproximación secular [17]. Bajo esta aproximación, la evolución se reduce a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left(A_{\beta}(\omega) \hat{\rho}_{IS}(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega) \hat{\rho}_{IS}(t) \right) \\ &+ \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) \left(A_{\alpha}(\omega) \hat{\rho}_{IS}(t) A_{\beta}^{\dagger}(\omega) - \hat{\rho}_{IS}(t) A_{\beta}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha}(\omega) \right). \end{aligned}$$

Separando la función espectral en parte real e imaginaria,

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

se obtiene la ecuación de Lindblad en el cuadro de interacción:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = -i[\hat{H}_{LS}, \hat{\rho}_{IS}(t)] + \mathcal{L}_g(\hat{\rho}_{IS}(t)), \quad (1.11)$$

con Hamiltoniano de *Lamb shift*

$$\hat{H}_{LS} = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} S_{\alpha\beta}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega),$$

y disipador en forma GKLS

$$\mathcal{L}_g(\hat{\rho}_{IS}(t)) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\beta}(\omega) \hat{\rho}_{IS}(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), \hat{\rho}_{IS}(t) \} \right].$$

Esta forma garantiza la preservación de traza, hermiticidad y positividad de la matriz densidad [27].

Finalmente, en el cuadro de Schrödinger la ecuación de Lindblad se escribe como

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) = -i[\hat{H}_S + \hat{H}_{LS}, \hat{\rho}_S(t)] + \mathcal{L}_g(\hat{\rho}_S(t)). \quad (1.12)$$

Si el sistema S interactúa con múltiples reservorios, el disipador se descompone como suma de contribuciones,

$$\mathcal{L}_g(\hat{\rho}_S(t)) = \sum_{\alpha} \mathcal{L}_{\alpha, g}(\hat{\rho}_S(t)).$$

1.3. Termodinámica de sistemas abiertos

En esta sección se introduce la termodinámica de sistemas abiertos, siguiendo las referencias [22, 28]. Se definen las cantidades termodinámicas y se formulan las leyes de la termodinámica en un marco general válido tanto en equilibrio como fuera de equilibrio.

1.3.1. Cantidades termodinámicas

Se considera un sistema descrito por el Hamiltoniano total

$$\hat{H}_{tot}(t) = \hat{H}_S(t) + \sum_{\alpha} (\hat{H}_{\alpha} + \hat{V}_{\alpha}) = \hat{H}_S(t) + \hat{H}_B + \hat{V},$$

donde $\hat{H}_S(t)$ representa el Hamiltoniano del sistema, que en general puede depender explícitamente del tiempo; $\hat{H}_B = \sum_{\alpha} \hat{H}_{\alpha}$ corresponde a los Hamiltonianos de los reservorios térmicos; y $\hat{V} = \sum_{\alpha} \hat{V}_{\alpha}$ describe la interacción sistema-baño.

El sistema intercambia energía y partículas con los reservorios. En consecuencia, el cambio de energía puede descomponerse en dos contribuciones: una asociada al calor y otra al trabajo. El calor liberado por el reservorio α en el intervalo de tiempo $[0, t]$ se define como

$$\langle Q_{\alpha} \rangle = -\text{Tr}\{(\hat{H}_{\alpha} - \mu_{\alpha} \hat{N}_{\alpha}) \hat{\rho}_{tot}(t)\} + \text{Tr}\{(\hat{H}_{\alpha} - \mu_{\alpha} \hat{N}_{\alpha}) \hat{\rho}_{tot}(0)\}, \quad (1.13)$$

donde \hat{N}_{α} es el operador número de partículas en el reservorio α y μ_{α} su potencial químico. Por convención, $Q_{\alpha} > 0$ corresponde al calor transferido hacia el sistema. El trabajo promedio asociado al reservorio α se define como

$$\langle W_{\alpha} \rangle = -\mu_{\alpha} \left(\text{Tr}\{\hat{N}_{\alpha} \hat{\rho}_{tot}(t)\} - \text{Tr}\{\hat{N}_{\alpha} \hat{\rho}_{tot}(0)\} \right). \quad (1.14)$$

Estas definiciones permiten establecer las leyes de la termodinámica para sistemas abiertos.

1.3.2. Ley cero

Considérese un sistema total compuesto por un sistema reducido y un baño térmico, ambos en equilibrio caracterizado por una temperatura inversa β y un potencial químico μ . El estado de equilibrio del sistema total es el estado gran canónico

$$\hat{\rho}_{tot}^{eq} = \frac{e^{-\beta(\hat{H}_{tot} - \mu \hat{N}_{tot})}}{Z}, \quad Z = \text{Tr}\{e^{-\beta(\hat{H}_{tot} - \mu \hat{N}_{tot})}\},$$

con Z la función gran partición. El estado de equilibrio del sistema reducido corresponde a

$$\hat{\rho}_S = \frac{1}{Z} \text{Tr}_B\{e^{-\beta(\hat{H}_{tot} - \mu \hat{N}_{tot})}\}.$$

En el límite de acoplamiento débil entre sistema y baño, este estado converge a [29]

$$\hat{\rho}_S = \frac{e^{-\beta(\hat{H}_S - \mu \hat{N}_S)}}{\text{Tr}_S\{e^{-\beta(\hat{H}_S - \mu \hat{N}_S)}\}}.$$

1.3.3. Primera Ley

En mecánica estadística fuera del equilibrio, el sistema suele alcanzar un estado estacionario en el cual se establecen flujos constantes de energía y partículas. En este contexto resulta conveniente distinguir las contribuciones asociadas al calor y al trabajo intercambiados con cada reservorio α . Estas se introducen mediante la corriente de calor y la potencia

$$J_\alpha(t) = \partial_t \langle Q_\alpha \rangle, \quad \dot{W}_\alpha(t) = \partial_t \langle W_\alpha \rangle.$$

En el régimen de acoplamiento débil y para un Hamiltoniano independiente del tiempo, la primera ley adopta la forma

$$\partial_t E(t) = \sum_\alpha [J_\alpha(t) + \dot{W}_\alpha(t)], \quad E(t) = \text{Tr}\{\hat{H}_S \hat{\rho}_{tot}(t)\},$$

donde $E(t)$ es la energía interna del sistema, evaluada como el valor esperado del Hamiltoniano del sistema con respecto al estado total.

1.3.4. Segunda Ley

La formulación de la segunda ley requiere asumir una condición inicial no correlacionada entre el sistema y los reservorios:

$$\hat{\rho}_{tot}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes_\alpha \hat{\tau}_\alpha, \quad \hat{\tau}_\alpha = \frac{e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)}}{\text{Tr}\{e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)}\}}.$$

Donde cada reservorio α se encuentra en equilibrio gran canónico con temperatura inversa β_α y potencial químico μ_α . Con esta condición inicial, la segunda ley se expresa en términos de la producción de entropía $\sigma(t)$ [28]:

$$\sigma(t) \equiv \Delta S(t) - \sum_\alpha \beta_\alpha \langle Q_\alpha \rangle \geq 0,$$

donde $\Delta S(t)$ es el cambio en la entropía de von Neumann del sistema,

$$\Delta S(t) = -\text{Tr}\{\hat{\rho}_S(t) \ln \hat{\rho}_S(t)\} + \text{Tr}\{\hat{\rho}_S(0) \ln \hat{\rho}_S(0)\}.$$

La producción total de entropía se descompone en dos contribuciones: el cambio de entropía del sistema y la parte asociada al calor intercambiado con los reservorios. Para sistemas markovianos resulta conveniente estudiar la tasa de producción de entropía, ya que se cumple la desigualdad [30]

$$\dot{\sigma}(t) \equiv \partial_t \Delta S(t) - \sum_\alpha \beta_\alpha J_\alpha(t) \geq 0.$$

La igualdad se cumple en el caso de procesos reversibles.

De este modo, las leyes de la termodinámica se expresan en términos de flujos continuos de energía y partículas, los cuales pueden calcularse a partir de la matriz densidad reducida. En esta tesis, tales cantidades serán analizadas principalmente en el régimen estacionario.

Capítulo 2

Ecuación de Lindblad con aproximación secular-parcial

En este capítulo se presenta el formalismo de *full counting statistics* (FCS), que a partir de la matriz densidad reducida describe la estadística de los flujos de partículas y de energía en sistemas cuánticos, permitiendo cuantificar sus fluctuaciones [31, 32]. Para ello, se introduce el esquema de medición en dos puntos, ampliamente utilizado en termodinámica cuántica para definir distribuciones de probabilidad de magnitudes estocásticas, tales como la energía y el número de partículas en los reservorios. A partir de dichas distribuciones es posible obtener momentos y cumulantes que caracterizan las propiedades estadísticas de las variables de interés [31].

A continuación, se introduce el formalismo de superoperadores, que permite expresar la evolución de la matriz densidad en un espacio de Hilbert aumentado. Posteriormente, se desarrolla el cálculo de la ecuación maestra generalizada, deducida en [22] mediante el formalismo FCS. Finalmente, se analiza la consistencia termodinámica, tanto en el caso de la ecuación maestra global como en el de la ecuación maestra semilocal.

El capítulo se organiza de la siguiente manera: en la sección 2.1 se introduce la estadística de medición en dos puntos; en la sección 2.2 se presenta el formalismo de superoperadores; en la sección 2.3 se desarrolla el cálculo de la ecuación maestra generalizada; y en la sección 2.4 se discute la consistencia termodinámica.

2.1. Estadística de medición en dos puntos

En esta sección se introduce el esquema de medición en dos puntos, ampliamente utilizado en termodinámica cuántica para definir distribuciones de probabilidad de magnitudes estocásticas[31]. El objetivo es caracterizar rigurosamente el calor y el trabajo intercambiados con los reservorios como variables aleatorias, en lugar de limitarse únicamente a sus valores promedio. Aunque dichos promedios pueden calcularse mediante las expresiones 1.13 y 1.14, la naturaleza cuántica de la evolución implica que los resultados de una medición sobre los reservorios pueden variar en diferentes repeticiones del experimento. Por ello, resulta natural describir el problema en términos de la distribución de probabilidad asociada al calor y al trabajo.

Consideremos un sistema total con condición inicial factorizada

$$\hat{\rho}_{tot}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes_{\alpha} \hat{\tau}_{\alpha},$$

donde $\hat{\tau}_\alpha$ es el estado de equilibrio gran canónico del reservorio α . Denotemos por $\mathbf{E} = (E_\alpha)$ y $\mathbf{N} = (N_\alpha)$ los vectores formados por las energías y los números de partículas de los reservorios, y por $\mathbf{Q} = (Q_\alpha)$ y $\mathbf{W} = (W_\alpha)$ los correspondientes calores y trabajos intercambiados. La distribución conjunta de calor y trabajo se escribe como

$$P(\mathbf{Q}, \mathbf{W}) = \sum_{\mathbf{E}, \mathbf{E}', \mathbf{N}, \mathbf{N}'} P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N}) P_0(\mathbf{E}, \mathbf{N}) \\ \times \prod_{\alpha} \delta(W_\alpha - \mu_\alpha(N_\alpha - N'_\alpha)) \delta(Q_\alpha + W_\alpha - (E_\alpha - E'_\alpha)).$$

Aquí, W_α representa el trabajo asociado al intercambio de partículas con el reservorio α , mientras que Q_α corresponde al calor transferido desde dicho reservorio hacia el sistema.

La probabilidad inicial de que cada reservorio α tenga energía E_α y número de partículas N_α está dada por

$$P_0(\mathbf{E}, \mathbf{N}) = \prod_{\alpha} \frac{e^{-\beta_\alpha(E_\alpha - \mu_\alpha N_\alpha)}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)} \right\}}.$$

La probabilidad condicional $P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N})$ describe la probabilidad de encontrar los reservorios con energías \mathbf{E}' y números de partículas \mathbf{N}' en el tiempo t , dados valores iniciales (\mathbf{E}, \mathbf{N}) . Para describir este proceso, se parte del estado proyectado en $t = 0$,

$$\hat{\rho}'(0) = \frac{\hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}} \hat{\rho}(0) \hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}}}{\text{Tr} \{ \hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}} \hat{\rho}(0) \hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}} \}},$$

donde $\hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}} = I_S \otimes \hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}}^B$ es el proyector sobre los autoestados de energía y número de partículas de los reservorios, con $\hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}}^B = |\mathbf{E}, \mathbf{N}\rangle \langle \mathbf{E}, \mathbf{N}|$. Tras la evolución unitaria hasta un tiempo t ,

$$\hat{\rho}'(t) = \hat{U}(t) \hat{\rho}'(0) \hat{U}^\dagger(t),$$

una segunda medición proyectiva sobre los reservorios entrega los valores \mathbf{E}', \mathbf{N}' , con probabilidad

$$P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N}) = \text{Tr} \{ \hat{P}_{\mathbf{E}', \mathbf{N}'} \hat{\rho}'(t) \hat{P}_{\mathbf{E}', \mathbf{N}'} \}.$$

Al reescribir los proyectores explícitamente, se obtiene

$$P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N}) = \text{Tr}_S \{ \hat{M} \hat{\rho}_S(0) \hat{M}^\dagger \}, \quad \hat{M} = \text{Tr}_B \{ |\mathbf{E}, \mathbf{N}\rangle \langle \mathbf{E}', \mathbf{N}'| \hat{U}(t) \}.$$

Definida la distribución de probabilidad, se introduce la función generadora de momentos, a partir de la cual pueden obtenerse los momentos y cumulantes de calor y trabajo:

$$\Lambda(\vec{\lambda}, \vec{\chi}) = \int d\mathbf{Q} d\mathbf{W} P(\mathbf{Q}, \mathbf{W}) e^{-i\vec{\lambda} \cdot \mathbf{Q} - i\vec{\chi} \cdot \mathbf{W}}. \quad (2.1)$$

Esta función puede reescribirse en términos de una evolución modificada de la matriz densidad total [31],

$$\Lambda(\vec{\lambda}, \vec{\chi}) = \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t) \}, \quad \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t) = \hat{U}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t) \hat{\rho}_{tot}(0) \hat{U}^\dagger(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t), \quad (2.2)$$

donde

$$\hat{U}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t) = e^{\frac{i}{2} \sum_{\alpha} [\lambda_{\alpha}(\hat{H}_{\alpha} - \mu_{\alpha} \hat{N}_{\alpha}) + \chi_{\alpha} \mu_{\alpha} \hat{N}_{\alpha}]} \hat{U}(t) e^{-\frac{i}{2} \sum_{\alpha} [\lambda_{\alpha}(\hat{H}_{\alpha} - \mu_{\alpha} \hat{N}_{\alpha}) + \chi_{\alpha} \mu_{\alpha} \hat{N}_{\alpha}]}.$$

Los parámetros $\vec{\lambda}$ y $\vec{\chi}$ se denominan *counting fields*[31, 32], mientras que $\hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t)$ recibe el nombre de matriz densidad generalizada. El conocimiento de su evolución permite calcular de manera sistemática los momentos y cumulantes del calor, del trabajo y, en general, de cualquier observable de interés. Sin embargo, dado que esta matriz se construye a partir de la evolución unitaria de $\hat{\rho}_{tot}(t)$, resulta necesario derivar una ecuación maestra efectiva que describa únicamente los grados de libertad del sistema reducido, lo que se abordará en secciones futuras.

2.2. Formalismo de superoperadores y espacio de Liouville

Un operador en el espacio de Hilbert, representado por $\hat{\rho}$ y de dimensión $N \times N$, puede mapearse al espacio de Liouville mediante un vector columna $|\rho\rangle\rangle$ de dimensión $N^2 \times 1$. De manera análoga, un superoperador \mathcal{L} que actúa sobre $\hat{\rho}$ en el espacio de Hilbert se representa en el espacio de Liouville por una matriz $\check{\mathcal{L}}$ de dimensión $N^2 \times N^2$, la cual actúa sobre $|\rho\rangle\rangle$. La notación $|\cdot\rangle\rangle$ denota este mapeo, conocido como vectorización, que permite tratar operadores como vectores y superoperadores como matrices.

En este espacio se definen las siguientes operaciones fundamentales:

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle \equiv \text{Tr}\{\hat{A}^{\dagger} \hat{B}\},$$

$$\check{1} \equiv \sum_{n,n'} |nn'\rangle\rangle \langle\langle nn'|,$$

$$|nn'\rangle\rangle \longleftrightarrow |n\rangle\langle n'|, \quad \langle\langle nn'| \longleftrightarrow |n'\rangle\langle n|,$$

y se verifican las relaciones

$$\langle\langle nn'|mm'\rangle\rangle = \delta_{nm}\delta_{n'm'}, \quad \langle\langle nn'|A\rangle\rangle = \langle n|\hat{A}|n'\rangle, \quad \langle\langle 1|A\rangle\rangle = \text{Tr}\{\hat{A}\}.$$

Si la evolución de la matriz densidad $|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle$ está gobernada por el superoperador $\check{\mathcal{L}}$, la dinámica en el espacio de Liouville se describe como

$$\frac{d}{dt} |\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{L}} |\hat{\rho}(t)\rangle\rangle,$$

cuya solución formal es

$$|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = e^{\check{\mathcal{L}}t} |\hat{\rho}(0)\rangle\rangle. \quad (2.3)$$

Asimismo, en este marco se definen los superoperadores de proyección de Nakajima–Zwanzig, que actúan sobre la matriz densidad total. En particular, el superoperador $\check{\mathcal{P}}$ proyecta sobre la parte relevante de la dinámica, mientras que $\check{\mathcal{Q}} = \check{1} - \check{\mathcal{P}}$ proyecta sobre la parte

irrelevante [24]. Estos operadores cumplen las propiedades algebraicas

$$\begin{aligned}\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}} &= \check{1}, \\ \check{\mathcal{P}}^2 &= \check{\mathcal{P}}, \\ \check{\mathcal{Q}}^2 &= \check{\mathcal{Q}}, \\ \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{Q}} &= \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{P}} = 0.\end{aligned}$$

La evolución temporal de la matriz densidad descompuesta en estas dos partes satisface

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle &= \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle, \\ \frac{d}{dt}\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle &= \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle.\end{aligned}$$

2.3. Ecuación maestra generalizada

Considérese un Hamiltoniano total $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \epsilon\hat{H}_I \equiv \hat{H}_0 + \epsilon\hat{H}_I$, donde ϵ es un parámetro adimensional que permitirá implementar posteriormente el régimen de acoplamiento débil. Si este Hamiltoniano se emplea en la evolución unitaria $\hat{U}(t)$ de la ecuación (2.2), se obtiene

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = -i[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)] - i\epsilon[\hat{V}_\lambda \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) - \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{V}_{-\lambda}], \quad (2.4)$$

con

$$\hat{V}_\lambda = e^{-\frac{i}{2}\hat{A}(\lambda, \chi)} \hat{H}_I e^{\frac{i}{2}\hat{A}(\lambda, \chi)}, \quad \hat{A}(\lambda, \chi) = -\sum_\alpha [\lambda_\alpha (\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha) + \chi_\alpha \mu_\alpha \hat{N}_\alpha].$$

En el formalismo de superoperadores, la ecuación (2.4) adopta la forma

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}|\hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle &= \check{\mathcal{L}}_\lambda |\hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \\ &= (\check{\mathcal{L}}_0 + \epsilon \check{\mathcal{L}}'_\lambda) |\hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle.\end{aligned}$$

Al pasar al cuadro de interacción se define

$$\begin{aligned}|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle &= e^{-\check{\mathcal{L}}_0 t} |\hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \\ &\longleftrightarrow e^{i\hat{H}_0 t} \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) e^{-i\hat{H}_0 t},\end{aligned}$$

y el superoperador de Liouville con parámetros de conteo se transforma como

$$\check{\mathcal{L}}_\lambda(t) = e^{-\check{\mathcal{L}}_0 t} \check{\mathcal{L}}_\lambda e^{\check{\mathcal{L}}_0 t}.$$

La evolución temporal en el cuadro de interacción queda entonces

$$\frac{d}{dt}|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle = \epsilon \check{\mathcal{L}}_\lambda(t) |\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle. \quad (2.5)$$

De este modo, la evolución de los grados de libertad del sistema reducido (en el espacio

de Hilbert) se describe por

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\rho}}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = \epsilon^2 \int_0^t ds & \left[-\text{Tr}_B \left\{ \hat{V}_\lambda(t) \hat{V}_\lambda(t-s) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \right\} - \text{Tr}_B \left\{ \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \hat{V}_{-\lambda}(t-s) \hat{V}_{-\lambda}(t) \right\} \right. \\ & \left. + \text{Tr}_B \left\{ \hat{V}_\lambda(t) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \hat{V}_{-\lambda}(t-s) \right\} + \text{Tr}_B \left\{ \hat{V}_\lambda(t-s) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \hat{V}_{-\lambda}(t) \right\} \right], \quad (2.6) \end{aligned}$$

donde $\hat{\rho}_R^{eq} = \bigotimes_\alpha \hat{\tau}_\alpha$ es el estado de equilibrio del conjunto de reservorios. La demostración de la ecuación (2.6) se presenta en el apéndice A.2.

Escribiendo la interacción como

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \sum_{\alpha,k} \hat{S}_{\alpha,k} \hat{B}_{\alpha,k}, \\ \hat{V}_\lambda &= \sum_{\alpha,k} \hat{S}_{\alpha,k} \hat{B}_{\alpha,k,\lambda}, \\ \hat{B}_{\alpha,k,\lambda} &\equiv e^{\frac{i}{2}[\lambda_\alpha(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha) + \chi_\alpha \mu_\alpha \hat{N}_\alpha]} \hat{B}_{\alpha,k} e^{-\frac{i}{2}[\lambda_\alpha(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha) + \chi_\alpha \mu_\alpha \hat{N}_\alpha]}, \end{aligned}$$

los operadores del baño satisfacen

$$[\hat{B}_{\alpha,k}, \hat{N}_\alpha] = n_{\alpha,k} \hat{B}_{\alpha,k},$$

donde $n_{\alpha,k}$ es el número de partículas intercambiado con el baño térmico α . Los operadores del sistema cumplen

$$\hat{U}_S^\dagger(t) \hat{S}_{\alpha,k} \hat{U}_S(t) = \sum_j e^{-i\omega_j t} \hat{S}_{\alpha,k;j},$$

con $\hat{S}_{\alpha,k;j}$ los operadores de salto y ω_j las frecuencias de Bohr del Hamiltoniano del sistema. Obsérvese que $\hat{S}_{\alpha,k}$ no tiene por qué ser autoadjunto (a diferencia del caso considerado en 1.2.2).

Definiendo las funciones de correlación $C_{k,k'}^\alpha(s) = \text{Tr} \left\{ e^{is\hat{H}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger e^{-is\hat{H}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,k'} \hat{\tau}_\alpha \right\}$, se obtiene la ecuación maestra generalizada

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = - \sum_{\alpha,k,k';j,j'} e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} \int_0^t ds \mathcal{I}(s, t), \quad (2.7)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(s, t) &= e^{i\omega_{j'}s} C_{k,k'}^\alpha(s) \hat{S}_{\alpha,k;j}^\dagger \hat{S}_{\alpha,k';j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) + e^{-i\omega_{j'}s} C_{k,k'}^\alpha(-s) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha,k;j}^\dagger \hat{S}_{\alpha,k';j'} \\ &- e^{-i\mu_\alpha n_{\alpha,k}(\lambda_\alpha - \chi_\alpha)} \left[e^{i\omega_{j'}s} C_{k,k'}^\alpha(s - \lambda_\alpha) + e^{-i\omega_{j'}s} C_{k,k'}^\alpha(-s - \lambda_\alpha) \right] \hat{S}_{\alpha,k';j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha,k;j}^\dagger. \quad (2.8) \end{aligned}$$

Esta ecuación se deduce en el apéndice A.3.

2.3.1. Resolución finita de energía

De forma análoga a 1.2.2, se busca una dinámica markoviana. Para ello se extiende el límite superior de integración temporal en la ecuación (2.7) hacia el infinito, lo cual es válido si el tiempo de correlación del baño τ_B es mucho menor que el tiempo de relajación del sistema τ_R . En presencia de parámetros de conteo λ_α , las funciones de correlación adquieren una dependencia modificada del tipo $C_{k,k'}^\alpha(\pm\tau - \lambda_\alpha)$. Por consiguiente, la aproximación de

Markov requiere que

$$C_{k,k'}^\alpha(\pm\tau - \lambda_\alpha) \approx 0 \quad \text{para } \tau > \tau_B,$$

lo que delimita el régimen de validez a

$$\tau_B \ll \tau_R, \quad |\lambda_\alpha| \ll \tau_R.$$

Esta condición implica una resolución finita en las diferencias de energía que pueden inferirse al medir el calor: λ_α y Q_α son variables conjugadas en la función generadora, por lo que obedecen una relación de incertidumbre [33]. En particular,

$$\langle \Delta \lambda_\alpha^2 \rangle \langle (\Delta Q_\alpha)^2 \rangle \geq \gamma \Rightarrow \langle (\Delta Q_\alpha)^2 \rangle \geq \gamma / \tau_R^2,$$

con $\gamma > 0$. En consecuencia, diferencias de energía del orden de $1/\tau_R$ dejan de ser resolubles y el promedio del calor puede ser comparable con su varianza. Para mantener la consistencia termodinámica, las leyes deben formularse considerando explícitamente esta resolución finita.

2.3.2. Agrupación de frecuencias

La ecuación de Redfield no garantiza en general la preservación de la positividad y puede producir probabilidades negativas en el estado reducido. La vía habitual para asegurar positividad es la aproximación secular (sección 1.2.2), que conduce a la forma GKLS, pero exige que las frecuencias de Bohr estén bien separadas respecto de $1/\tau_R$. Ello excluye cuasi-degeneraciones y suprime términos no seculares [34].

Un enfoque alternativo que conserva positividad sin descartar los términos no seculares parte de la condición markoviana $\tau_B \ll \tau_R$, que garantiza que, para dos frecuencias de transición distintas, se cumple al menos una de las desigualdades

$$|\omega_j - \omega_{j'}| \ll 1/\tau_B \quad \text{o} \quad |\omega_j - \omega_{j'}| \gg 1/\tau_R.$$

De este modo, se agrupan las frecuencias en subconjuntos x_q : si satisfacen la primera desigualdad pertenecen al mismo subconjunto; si satisfacen la segunda, pertenecen a subconjuntos distintos,

$$\begin{aligned} |\omega_j - \omega_{j'}| \ll 1/\tau_B &\Rightarrow \omega_j, \omega_{j'} \in x_q, \\ |\omega_j - \omega_{j'}| \gg 1/\tau_R &\Rightarrow \omega_j \in x_q, \omega_{j'} \in x_{q'}. \end{aligned}$$

Para frecuencias en subconjuntos distintos, la aproximación secular es válida (los factores $e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t}$ se promedian a cero). Dentro de un mismo subconjunto x_q , la resolución finita impide distinguir transiciones cercanas; por tanto, en las funciones de correlación espectral $\gamma^\alpha(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} C^\alpha(s)$ se sustituyen las frecuencias $\omega_j \in x_q$ por una frecuencia representativa ω_q , es decir,

$$e^{i\omega_j s}, e^{i\omega_{j'} s} \rightarrow e^{i\omega_q s}, \quad |\omega_q - \omega_j| \ll 1/\tau_B \quad \forall \omega_j \in x_q.$$

Esta sustitución implementa una descripción coarse-grained compatible con la positividad y la resolución energética finita [35].

Aplicando este esquema en la ecuación (2.7) y extendiendo $s \in [0, \infty)$, se obtiene la

ecuación en forma GKLS

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = -i[\hat{H}_{LS}, \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)] + \sum_{\alpha} \tilde{\mathcal{L}}_{\alpha}^{\chi_{\alpha}, \lambda_{\alpha}} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t), \quad (2.9)$$

con

$$\tilde{\mathcal{L}}_{\alpha}^{\chi_{\alpha}, \lambda_{\alpha}} \hat{\rho} = \sum_{k,q} \gamma_k^{\alpha}(\omega_q) \left[e^{i\lambda_{\alpha}\omega_q + i(\chi_{\alpha} - \lambda_{\alpha})\mu_{\alpha}n_{\alpha,k}} \hat{S}_{\alpha,k;q}(t) \hat{\rho} \hat{S}_{\alpha,k;q}^{\dagger}(t) - \frac{1}{2} \{ \hat{S}_{\alpha,k;q}^{\dagger}(t) \hat{S}_{\alpha,k;q}(t), \hat{\rho} \} \right],$$

donde

$$\hat{S}_{\alpha,k;q}(t) = \sum_{\{j: \omega_j \in x_q\}} e^{-i\omega_j t} \hat{S}_{\alpha,k;j},$$

y el Hamiltoniano de *Lamb shift*

$$\hat{H}_{LS}(t) = \sum_{\alpha,k;q} S_k^{\alpha}(\omega_q) \hat{S}_{\alpha,k;q}^{\dagger}(t) \hat{S}_{\alpha,k;q}(t),$$

con

$$\gamma_k^{\alpha}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} C_{k,k}^{\alpha}(s), \quad S_k^{\alpha}(\omega) = -\frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \text{sign}(s) C_{k,k}^{\alpha}(s). \quad (2.10)$$

Aquí se asume, por simplicidad, $C_{k,k'}^{\alpha} \propto \delta_{k,k'}$. La deducción completa se incluye en el apéndice A.4.

En el límite $\vec{\lambda}, \vec{\chi} \rightarrow 0$ se recupera

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = -i[\hat{H}_{LS}(t), \hat{\rho}_{IS}(t)] + \sum_{\alpha} \tilde{\mathcal{L}}_{\alpha} \hat{\rho}_{IS}(t),$$

con

$$\tilde{\mathcal{L}}_{\alpha} = \sum_{\{q: \omega_q > 0\}} \sum_k \gamma_k^{\alpha}(\omega_q) \left[\mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}(t)] + e^{-\beta_{\alpha}(\omega_q - \mu_{\alpha}n_{\alpha,k})} \mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}^{\dagger}(t)] \right],$$

y

$$\mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}] \hat{\rho}_S(t) = \hat{S}_{\alpha,k;q} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{\alpha,k;q}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{ \hat{S}_{\alpha,k;q}^{\dagger} \hat{S}_{\alpha,k;q}, \hat{\rho}_S(t) \}.$$

Para un Hamiltoniano independiente del tiempo, la ecuación en el cuadro de Schrödinger es

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) = -i[\hat{H}_S + \hat{H}_{LS}, \hat{\rho}_S(t)] + \sum_{\alpha} \mathcal{L}_{\alpha}(\hat{\rho}_S(t)), \quad (2.11)$$

con

$$\mathcal{L}_{\alpha} = \sum_{\{q: \omega_q > 0\}} \sum_k \gamma_k^{\alpha}(\omega_q) \left[\mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}] + e^{-\beta_{\alpha}(\omega_q - \mu_{\alpha}n_{\alpha,k})} \mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}^{\dagger}] \right]. \quad (2.12)$$

Existen dos límites de interés. (i) Si todas las frecuencias satisfacen $|\omega_j - \omega_{j'}| \gg 1/\tau_R$, entonces $\mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}] = \mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;j}]$ y la aproximación secular es válida para todas las transiciones, recuperándose la ecuación de Lindblad 1.12. (ii) Si $|\omega_j - \omega_{j'}| \ll 1/\tau_B$, todas las frecuencias pertenecen a un único subconjunto; en tal caso $\hat{S}_{\alpha,k;q} = \hat{S}_{\alpha,k}$ y la ecuación maestra queda descrita por operadores locales (ecuación maestra local) [36]. A partir de este punto, la ecuación (2.11) será denominada ecuación maestra *semilocal*.

2.4. Consistencia termodinámica

Para derivar las leyes de la termodinámica en el marco de las ecuaciones maestras cuánticas es necesario distinguir entre dos escenarios: (i) la ecuación maestra global definida en la sección 1.2.2, y (ii) la ecuación maestra semilocal, que presenta un mayor desafío. En este último caso, la resolución finita de energía impuesta por la dinámica markoviana obliga a redefinir cuidadosamente las magnitudes termodinámicas para asegurar la consistencia. Con este fin, se introduce el Hamiltoniano termodinámico \hat{H}_{TD} , el cual satisface la relación de conmutación

$$[\hat{S}_{\alpha,k;j}, \hat{H}_{TD}] = \omega_q \hat{S}_{\alpha,k;j},$$

para todas las frecuencias $\omega_j \in x_q$. Dicho Hamiltoniano se construye a partir de \hat{H}_S , modificando sus autovalores de manera que todas las transiciones dentro de un mismo conjunto x_q compartan una frecuencia efectiva ω_q .

Primera ley

En el caso global, la energía interna se define como

$$E_g(t) = \text{Tr}\{\hat{H}_S \hat{\rho}(t)\}.$$

En la ecuación maestra semilocal, la energía interna se redefine en función del Hamiltoniano termodinámico:

$$E(t) = \text{Tr}\{\hat{H}_{TD} \hat{\rho}(t)\}. \quad (2.13)$$

La corriente de calor y la potencia entregadas por el baño α en el caso global se expresan como

$$J_{\alpha,g}(t) = \text{Tr}\{(\hat{H}_S - \mu_\alpha \hat{N}_S) \mathcal{L}_{\alpha,g} \hat{\rho}_S(t)\}, \quad \dot{W}_{\alpha,g}(t) = \mu_\alpha \text{Tr}\{\hat{N}_S \mathcal{L}_{\alpha,g} \hat{\rho}_S(t)\},$$

donde $\mathcal{L}_{\alpha,g}$ es el superoperador de Lindblad asociado al baño α , correspondiente a la ecuación maestra global 1.12.

De manera análoga, para la ecuación semilocal se obtiene

$$J_\alpha(t) = \text{Tr}\{(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S) \mathcal{L}_\alpha \hat{\rho}_S(t)\}, \quad \dot{W}_\alpha(t) = \mu_\alpha \text{Tr}\{\hat{N}_S \mathcal{L}_\alpha \hat{\rho}_S(t)\}. \quad (2.14)$$

Estas definiciones cumplen automáticamente con la primera ley de la termodinámica. En efecto, al derivar la energía interna en el caso global se obtiene

$$\partial_t E_g(t) = \text{Tr}\{\hat{H}_S \partial_t \hat{\rho}_S(t)\} = \sum_\alpha [J_{\alpha,g}(t) + \dot{W}_{\alpha,g}(t)].$$

De forma análoga, utilizando la relación de conmutación $[\hat{H}_{TD}, \hat{H}_S + \hat{H}_{LS}] = 0$, se obtiene para el caso semilocal

$$\partial_t E(t) = \text{Tr}\{\hat{H}_{TD} \partial_t \hat{\rho}_S(t)\} = \sum_\alpha [J_\alpha(t) + \dot{W}_\alpha(t)].$$

Ley cero

En el caso global, el estado de equilibrio para el baño α cumple

$$\mathcal{L}_{\alpha,g} e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_S - \mu_\alpha \hat{N}_S)} = 0,$$

y, si todos los reservorios poseen la misma temperatura inversa β y el mismo potencial químico μ , el estado de Gibbs corresponde a

$$\hat{\rho}_{G,g} = \frac{e^{-\beta(\hat{H}_S - \mu \hat{N}_S)}}{\text{Tr}\{e^{-\beta(\hat{H}_S - \mu \hat{N}_S)}\}}.$$

Por el contrario, para la ecuación semilocal se cumple que

$$\mathcal{L}_\alpha e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} = 0, \quad (2.15)$$

y, en condiciones de equilibrio, el estado de Gibbs está dado por

$$\hat{\rho}_G = \frac{e^{-\beta(\hat{H}_{TD} - \mu \hat{N}_S)}}{\text{Tr}\{e^{-\beta(\hat{H}_{TD} - \mu \hat{N}_S)}\}}.$$

Segunda ley

La tasa de producción de entropía se define a partir de la desigualdad de Spohn [37], la cual garantiza la no negatividad de la entropía producida en procesos irreversibles. De este modo, para la ecuación global se obtiene

$$\dot{\sigma}_g(t) = -\frac{d}{dt} \text{Tr}\{\hat{\rho}_S(t) \ln \hat{\rho}_S(t)\} - \sum_\alpha \beta_\alpha J_{\alpha,g}(t) = -\sum_\alpha \text{Tr}\left\{(\mathcal{L}_{\alpha,g} \hat{\rho}_S(t)) [\ln \hat{\rho}_S(t) - \ln \hat{\rho}_{G,g}(\beta_\alpha, \mu_\alpha)]\right\} \geq 0.$$

De manera análoga, en la ecuación semilocal la tasa de producción de entropía es

$$\dot{\sigma}(t) = -\frac{d}{dt} \text{Tr}\{\hat{\rho}_S(t) \ln \hat{\rho}_S(t)\} - \sum_\alpha \beta_\alpha J_\alpha(t) = -\sum_\alpha \text{Tr}\left\{(\mathcal{L}_\alpha \hat{\rho}_S(t)) [\ln \hat{\rho}_S(t) - \ln \hat{\rho}_G(\beta_\alpha, \mu_\alpha)]\right\} \geq 0, \quad (2.16)$$

donde la desigualdad asegura la validez de la segunda ley en ambos marcos [22].

En resumen, la formulación termodinámica basada en la ecuación maestra semilocal requiere redefinir las magnitudes termodinámicas utilizando el Hamiltoniano termodinámico \hat{H}_{TD} . Con estas definiciones, se garantiza la validez de las leyes de la termodinámica, incluso en presencia de cuasi-degeneraciones y sin necesidad de descartar términos no seculares.

Contar con un marco termodinámico consistente para sistemas cuánticos abiertos constituye un paso esencial para abordar, en el capítulo siguiente, el estudio del rol de la información y de los flujos de información en estos sistemas.

Capítulo 3

Flujos de información

Los sistemas físicos no sólo intercambian energía entre sí, sino que también comparten información. Este intercambio de información puede tener consecuencias termodinámicas relevantes, como lo ejemplifica el paradigma del Demonio de Maxwell, que muestra cómo la información puede utilizarse para extraer trabajo de un sistema. Tradicionalmente, la paradoja se ha estudiado en el marco de demonios no autónomos, en los cuales es necesaria la intervención de un agente externo encargado de realizar mediciones y retroalimentación. No obstante, comprender cómo fluye la información en sistemas autónomos resulta igualmente fundamental, dado que en estos casos tanto la dinámica como la retroalimentación son generadas internamente, sin control externo. Este tipo de procesos aparece de manera natural en sistemas biológicos y en dispositivos tecnológicos modernos [38, 39], y su implementación experimental puede ser más accesible que la de los demonios no autónomos, donde se requiere una intervención activa del observador.

En este capítulo se introduce el concepto de información termodinámica. En la sección 3.1 se revisa el paradigma del Demonio de Maxwell como punto de partida. A continuación, en la sección 3.2 se presenta el Demonio de Maxwell autónomo, enfatizando su carácter intrínseco. Finalmente, en las secciones 3.3 y 3.6 se formaliza el concepto de flujos de información, utilizando como herramientas la termodinámica estocástica en el marco clásico y la evolución de la matriz densidad en el marco cuántico[13, 14].

3.1. Demonio de Maxwell

El demonio de Maxwell es un experimento mental propuesto por James Clerk Maxwell en su obra [1]. Consiste en una caja dividida en dos compartimientos, A y B, cada uno de ellos lleno con un gas ideal a temperatura T y presión P , como se muestra en la Figura 3.1. Entre ambos compartimientos existe una compuerta sin masa, que permite el paso de partículas de un lado a otro. Esta puerta es controlada por un ente denominado “Demonio”, el cual tiene la capacidad de manipularla sin costo energético. La característica esencial del Demonio es que conoce la velocidad de cada partícula en ambos compartimientos, de modo que puede discriminar entre partículas rápidas y lentas. Dado que la temperatura está directamente relacionada con la velocidad promedio de las partículas, esta diferencia influye en la temperatura del compartimiento hacia el cual se dirigen. En particular, el Demonio permite el paso del compartimiento A al B únicamente a las partículas más rápidas, mientras que deja pasar del compartimiento B al A las más lentas. Si el número de partículas en cada compartimiento permanece constante, este proceso conduce a un aumento de la temperatura

en A y a una disminución en B, generando así una diferencia ΔT entre ambos lados.

El cambio de entropía del sistema es

$$\begin{aligned}\Delta S &= \Delta S_A + \Delta S_B = C_V \left(\log \frac{T - \Delta T}{T} + \log \frac{T + \Delta T}{T} \right) \\ &= C_V \log \left(1 - \frac{\Delta T^2}{T^2} \right) < 0,\end{aligned}$$

donde C_V representa la capacidad calorífica a volumen constante.

De este cálculo se concluye que, sin realizar trabajo externo, el Demonio provoca una disminución de la entropía total, lo que constituye una aparente violación de la segunda ley de la termodinámica.

La paradoja fue abordada a lo largo del siglo XX mediante distintos enfoques. En primer lugar, Szilard introdujo un modelo explícito de motor controlado por un Demonio [2], mientras que Brillouin destacó la conexión entre información y entropía [3]. Posteriormente, Landauer formuló el principio que lleva su nombre, estableciendo que el borrado de información conlleva una disipación mínima de energía [4]. Finalmente, Bennett mostró que el costo energético fundamental asociado al Demonio se encuentra en la operación de borrado de memoria [5]. En conjunto, estos desarrollos restablecen la validez de la segunda ley en presencia de procesos de adquisición y procesamiento de información.

En sistemas no autónomos, es decir, aquellos manipulados por un agente externo a través del control de variables macroscópicas, la paradoja de Maxwell ha sido estudiada en detalle. Un ejemplo clásico es el motor de Szilard [2], en el cual se puede cuantificar tanto la energía requerida para realizar una medición como el costo energético asociado al borrado de memoria del Demonio, junto con el trabajo máximo extraíble mediante retroalimentación (*feedback*) [40, 41]. No obstante, el caso de sistemas autónomos, en los cuales no existe intervención externa y tanto la dinámica como la retroalimentación son generadas internamente, presenta características fundamentales que requieren un análisis más detallado.

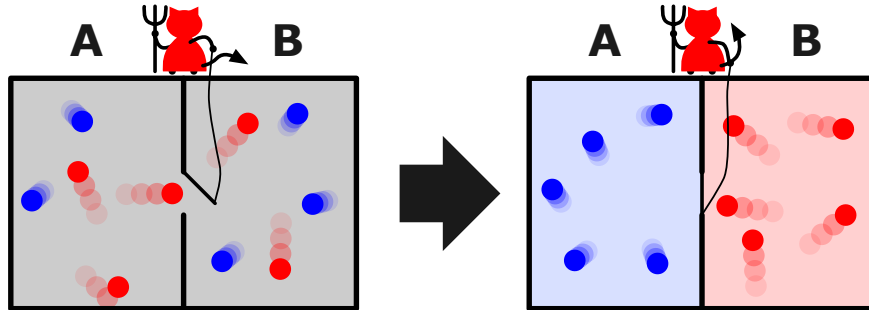


Figura 3.1: Esquema que representa al Demonio de Maxwell. En la primera etapa, ambos compartimentos contienen un gas ideal distribuido homogéneamente. Posteriormente, al permitir el paso selectivo de partículas, el compartimento A queda enriquecido en partículas lentas (más frías) y el compartimento B en partículas rápidas (más calientes). Figura adaptada de [42].

3.2. Demonio de Maxwell autónomo

Muchos procesos físicos requieren la interacción entre un conjunto de subsistemas que, en conjunto, conforman un sistema global. Esta interacción no se limita al intercambio de energía o partículas, sino que también implica un intercambio de información, a medida que los subsistemas se correlacionan entre sí de manera autónoma, es decir, sin la intervención de un agente externo que realice retroalimentación (*feedback*).

Comprender cómo los flujos de información pueden ser utilizados para realizar tareas útiles es de gran relevancia. Un ejemplo claro se encuentra en sistemas biológicos, donde ocurre la adaptación sensorial: un organismo monitorea su entorno mientras ajusta su respuesta al mismo [43]. Para caracterizar este tipo de procesos, se considera el Demonio de Maxwell autónomo como un sistema bipartito. Una de sus partes corresponde al sistema controlado, mientras que la otra funciona como detector, el cual ejerce control mediante una interacción física que afecta al sistema controlado.

Un requisito fundamental es que el sistema sea verdaderamente autónomo, lo que significa que el Hamiltoniano total debe ser independiente del tiempo y que no se admiten intervenciones externas, tales como mediciones explícitas o protocolos de retroalimentación.

3.3. Contexto clásico de los flujos de información

Para describir un Demonio de Maxwell autónomo es necesario caracterizar la evolución de un sistema acoplado a uno o más reservorios, y por lo tanto, sujeto a las leyes de la termodinámica en un contexto fuera del equilibrio.

Consideremos dos sistemas independientes, X e Y , cada uno con estados discretos denotados por x e y , respectivamente. Ambos sistemas presentan una dinámica interna gobernada por saltos aleatorios entre sus estados, cuyas tasas de transición están determinadas por los reservorios locales a los que se encuentran acoplados. Dichas tasas cumplen la condición de *balance detallado local* [44].

La evolución entre estados se modela como un proceso de Markov [45]. Para estudiar la evolución conjunta se introduce un acoplamiento bipartito: en este marco, si el sistema total se encuentra en el estado conjunto (x, y) , sólo son posibles transiciones del tipo $(x, y) \rightarrow (x, y')$ o $(x, y) \rightarrow (x', y)$, mientras que las transiciones simultáneas $(x, y) \rightarrow (x', y')$ están prohibidas.

La probabilidad $p(x, y)$ de encontrar al sistema en el estado (x, y) está gobernada por la ecuación maestra

$$d_t p(x, y) = \sum_{x', y'} \left[W_{x, x'}^{y, y'} p(x', y') - W_{x', x}^{y', y} p(x, y) \right],$$

donde la tasa de transición $W_{x, x'}^{y, y'}$ describe un salto del estado (x', y') al estado (x, y) . Para un sistema en contacto con un reservorio térmico, estas tasas obedecen la condición de balance detallado local

$$\ln \left(\frac{W_{x, x'}^{y, y'}}{W_{x', x}^{y', y}} \right) = - \frac{\epsilon_{x, y} - \epsilon_{x', y'}}{T},$$

la cual relaciona la razón de tasas de transición con el cambio de energía $\Delta\epsilon = \epsilon_{x, y} - \epsilon_{x', y'}$, intercambiado con el reservorio en forma de calor.

Debido a la estructura bipartita, las tasas adoptan la forma

$$W_{x,x'}^{y,y'} = \begin{cases} w_{x,x'}^y & \text{si } x \neq x', y = y', \\ w_x^{y,y'} & \text{si } x = x', y \neq y', \\ 0 & \text{si } x \neq x', y \neq y', \end{cases}$$

lo que refleja que en cada transición solo varía uno de los subsistemas.

La corriente de probabilidad se define como

$$J_{x,x'}^{y,y'} = W_{x,x'}^{y,y'} p(x', y') - W_{x',x}^{y',y} p(x, y).$$

A partir de esta definición, la ecuación maestra puede reescribirse en la forma

$$d_t p(x, y) = \sum_{x', y'} J_{x,x'}^{y,y'} = \sum_{x'} J_{x,x'}^y + \sum_{y'} J_x^{y,y'}.$$

Aquí,

$$J_x^{y,y'} = w_x^{y,y'} p(x, y') - w_x^{y',y} p(x, y),$$

representa la corriente de probabilidad asociada a un salto $y' \rightarrow y$ con x fijo, es decir, describe el flujo en la dirección Y condicionado al valor de x . De manera análoga, $J_{x,x'}^y$ describe el flujo en la dirección X condicionado a y .

Esta descomposición es fundamental, ya que la estructura bipartita permite separar las corrientes en dos componentes: una asociada a transiciones en la dirección X , y otra a transiciones en la dirección Y . Como consecuencia, es posible estudiar funcionales de la corriente, definidos como

$$\mathcal{A}(J) = \sum_{x,x',y,y'} J_{x,x'}^{y,y'} A_{x,x'}^{y,y'},$$

los cuales se descomponen naturalmente en dos contribuciones:

$$\mathcal{A}(J) = \sum_{x \geq x'; y \geq y'} J_{x,x'}^y A_{x,x'}^{y,y'} + \sum_{x \geq x'; y \geq y'} J_x^{y,y'} A_{x,x'}^{y,y'}. \quad (3.1)$$

De esta forma, la variación de \mathcal{A} puede interpretarse como la suma de dos contribuciones independientes: una correspondiente a transiciones en la dirección X y otra asociada a transiciones en la dirección Y .

3.4. Segunda ley de la termodinámica y flujos de información

El sistema conjunto XY , al estar en contacto con un baño térmico, constituye un sistema abierto cuya evolución se rige por las leyes de la termodinámica en condiciones fuera del equilibrio. Entre ellas, la segunda ley exige que la tasa de producción de entropía sea siempre no negativa, es decir,

$$\dot{\sigma} = \partial_t S^{XY} + \dot{S}_r \geq 0.$$

Aquí, $S^{XY} = -\sum_{x,y} p(x, y) \ln p(x, y)$ corresponde a la entropía de Shannon del sistema

conjunto. Su derivada temporal puede expresarse como

$$\partial_t S^{XY} = \sum_{x \geq x'; y \geq y'} J_{x,x'}^{y,y'} \ln \frac{p(x', y')}{p(x, y)}.$$

El cambio de entropía en el ambiente viene dado por

$$\dot{S}_r = \sum_{x \geq x'; y \geq y'} J_{x,x'}^{y,y'} \ln \frac{W_{x,x'}^{y,y'}}{W_{x',x}^{y',y}},$$

y por lo tanto

$$\dot{\sigma} = \sum_{x \geq x'; y \geq y'} J_{x,x'}^{y,y'} \ln \frac{W_{x,x'}^{y,y'} p(x', y')}{W_{x',x}^{y',y} p(x, y)} \geq 0.$$

La demostración rigurosa de estas expresiones se presenta en el apéndice B.1.

La entropía de Shannon del sistema XY mide la incertidumbre asociada a las variables aleatorias X e Y . Una forma natural de cuantificar las correlaciones entre estas variables es mediante la *información mutua*. Esta magnitud captura cuánto se reduce la incertidumbre en una variable cuando se conoce el valor de la otra, y constituye una medida de la información compartida entre los dos subsistemas [46, 47]. En términos de la probabilidad conjunta, la información mutua se define como

$$I_{XY} = \sum_{x,y} p(x, y) \ln \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} \geq 0.$$

De este modo, un valor elevado de I_{XY} indica que los subsistemas están fuertemente correlacionados, mientras que $I_{XY} = 0$ corresponde al caso de independencia estadística. Desde un punto de vista termodinámico, la información mutua permite cuantificar recursos informacionales que pueden emplearse para realizar trabajo o modificar flujos de energía en el sistema [46].

Para analizar la dinámica de estas correlaciones, se considera la variación temporal de la información mutua. Dicha variación puede descomponerse en dos contribuciones asociadas a las dinámicas locales de cada subsistema:

$$\partial_t I_{XY} = \dot{I}_X + \dot{I}_Y,$$

donde \dot{I}_X representa la contribución debida a la evolución del subsistema X (con Y fijo), y \dot{I}_Y la correspondiente al subsistema Y [13]. De manera explícita:

$$\dot{I}_X = \sum_{x \geq x'; y} J_{x,x'}^y \ln \frac{p(y|x)}{p(y|x')}, \quad (3.2)$$

$$\dot{I}_Y = \sum_{x; y \geq y'} J_x^{y,y'} \ln \frac{p(x|y)}{p(x|y')}. \quad (3.3)$$

Estos términos cuantifican los *flujos de información*. En particular, $\dot{I}_X > 0$ implica que, en promedio, las transiciones en la dirección X aumentan la información mutua, lo que equivale a que el subsistema X obtiene información acerca de Y . Por el contrario, si $\dot{I}_X < 0$, las transiciones en X reducen las correlaciones, lo que puede interpretarse como un consumo de

información para realizar trabajo o modificar flujos energéticos.

Dado que la tasa de producción de entropía es un funcional de la corriente de probabilidad, se puede emplear la ecuación (3.1) para escribir

$$\dot{\sigma} = \dot{\sigma}_X + \dot{\sigma}_Y,$$

con

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_X &= \sum_{x \geq x'; y} J_{x, x'}^y \ln \frac{w_{x, x'}^y p(x', y)}{w_{x', x}^y p(x, y)} \geq 0, \\ \dot{\sigma}_Y &= \sum_{x; y \geq y'} J_x^{y, y'} \ln \frac{w_x^{y, y'} p(x, y')}{w_x^{y', y} p(x, y)} \geq 0,\end{aligned}$$

lo que permite identificar las tasas de producción de entropía locales:

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_X &= \sum_{x \geq x'; y} J_{x, x'}^y \left[\ln \frac{p(x')}{p(x)} + \ln \frac{w_{x, x'}^y}{w_{x', x}^y} + \ln \frac{p(y|x')}{p(y|x)} \right], \\ \dot{\sigma}_Y &= \sum_{x; y \geq y'} J_x^{y, y'} \left[\ln \frac{p(y')}{p(y)} + \ln \frac{w_x^{y, y'}}{w_x^{y', y}} + \ln \frac{p(x|y')}{p(x|y)} \right].\end{aligned}$$

En términos de los flujos de información, estas ecuaciones toman la forma

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_X &= \partial_t S^X + \dot{S}_r^X - \dot{I}_X \geq 0, \\ \dot{\sigma}_Y &= \partial_t S^Y + \dot{S}_r^Y - \dot{I}_Y \geq 0.\end{aligned}$$

Estas expresiones muestran explícitamente cómo los flujos de información modifican la producción de entropía local en cada subsistema. En particular, si se ignora la interacción entre X e Y y sólo se monitorea X , la tasa de producción de entropía asignada sería

$$\dot{\sigma}_X^0 = \partial_t S^X + \dot{S}_r^X,$$

la cual puede ser negativa, reflejando una violación aparente de la segunda ley. Este fenómeno se interpreta como la acción efectiva de un Demonio de Maxwell, que aprovecha información oculta en las correlaciones.

En el régimen estacionario, donde $\partial_t I_{XY} = 0$, se conserva el flujo de información:

$$\dot{\mathcal{I}} = \dot{I}_X = -\dot{I}_Y,$$

y las producciones locales de entropía toman la forma

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_X &= \dot{S}_r^X - \dot{\mathcal{I}} \geq 0, \\ \dot{\sigma}_Y &= \dot{S}_r^Y + \dot{\mathcal{I}} \geq 0.\end{aligned}$$

En este contexto, si $\dot{\mathcal{I}} > 0$, el subsistema X actúa como un sensor al obtener información sobre Y , lo que requiere disipar al menos una cantidad de entropía equivalente a

$$\dot{S}_r^X \geq \dot{\mathcal{I}}.$$

Por otro lado, el subsistema Y proporciona información que puede aprovecharse para extraer energía del entorno, cumpliéndose

$$-\dot{S}_r^Y \leq \dot{\mathcal{I}}.$$

De este modo, el flujo de información $\dot{\mathcal{I}}$ establece una cota fundamental para el trabajo que puede extraerse a partir de correlaciones informacionales. Este principio constituye la base de la termodinámica de la información y será aplicado en el capítulo siguiente a un modelo específico donde el Demonio de Maxwell se manifiesta a través de corriente en contra de gradientes de potencial externos.

3.5. Contexto cuántico de los flujos de información

Para describir los flujos de información en un contexto cuántico es necesario caracterizar la dinámica de un sistema abierto acoplado a uno o varios reservorios. Dicha dinámica se describe mediante la matriz densidad reducida del sistema, mientras que el sistema total está gobernado por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_I.$$

En el régimen markoviano, la evolución temporal del sistema reducido se expresa mediante una ecuación maestra de la forma

$$\partial_t \hat{\rho}_S(t) = -i [\hat{H}_S + \hat{H}_{LS}, \hat{\rho}_S(t)] + \mathcal{L}(\hat{\rho}_S(t)),$$

la cual, en el marco de esta tesis, corresponde a la ecuación (1.12) o a la ecuación (2.11).

El acoplamiento con múltiples reservorios α se modela mediante un generador de Lindblad descompuesto en contribuciones locales. En el caso global,

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha} \mathcal{L}_{\alpha,g},$$

mientras que, en el caso semilocal,

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha} \mathcal{L}_{\alpha}.$$

Aquí, cada superoperador $\mathcal{L}_{\alpha,g}$ o \mathcal{L}_{α} representa la interacción efectiva con el reservorio α .

Supondremos que cada reservorio induce un equilibrio local descrito por un estado de Gibbs. Para acoplamiento global y semilocal, respectivamente,

$$\hat{\rho}_{\text{eq},g}^{\alpha} = \frac{1}{Z_{\beta_{\alpha},\mu_{\alpha};g}} e^{-\beta_{\alpha}(\hat{H}_S - \mu_{\alpha}\hat{N}_S)}, \quad \hat{\rho}_{\text{eq}}^{\alpha} = \frac{1}{Z_{\beta_{\alpha},\mu_{\alpha}}} e^{-\beta_{\alpha}(\hat{H}_{TD} - \mu_{\alpha}\hat{N}_S)}.$$

A partir de estos estados y aplicando la desigualdad de Spohn [48] se obtiene una forma local de la segunda ley. Para el caso global,

$$-\text{Tr}[(\mathcal{L}_{\alpha,g}\hat{\rho}_S)(\ln \hat{\rho}_S - \ln \hat{\rho}_{\text{eq},g}^{\alpha})] \geq 0, \quad (3.4)$$

mientras que, para el caso semilocal,

$$-\text{Tr}[(\mathcal{L}_{\alpha}\hat{\rho}_S)(\ln \hat{\rho}_S - \ln \hat{\rho}_{\text{eq}}^{\alpha})] \geq 0. \quad (3.5)$$

Definimos la tasa de cambio de la entropía de von Neumann inducida por el reservorio α como

$$\dot{S}^{\alpha,g} = -\text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha,g}\hat{\rho}_S)\ln\hat{\rho}_S\}, \quad \dot{S}^\alpha = -\text{Tr}\{(\mathcal{L}_\alpha\hat{\rho}_S)\ln\hat{\rho}_S\},$$

donde la entropía de von Neumann del sistema es

$$S = -\text{Tr}\{\hat{\rho}_S \ln \hat{\rho}_S\}.$$

Comparando las ecuaciones (3.4) y (3.5) se identifica el flujo de calor desde el reservorio α hacia el sistema como

$$J_{\alpha,g} = \text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha,g}\hat{\rho}_S)(\hat{H}_S - \mu_\alpha\hat{N}_S)\}, \quad J_\alpha = \text{Tr}\{(\mathcal{L}_\alpha\hat{\rho}_S)(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha\hat{N}_S)\}.$$

En consecuencia, las producciones locales de entropía cumplen

$$\dot{\sigma}_{\alpha,g} = \dot{S}^{\alpha,g} - \beta_\alpha J_{\alpha,g} \geq 0, \quad \dot{\sigma}_\alpha = \dot{S}^\alpha - \beta_\alpha J_\alpha \geq 0, \quad (3.6)$$

lo que constituye la versión local de la segunda ley. La suma de estas contribuciones recupera la formulación global:

$$\sum_\alpha \dot{\sigma}_{\alpha,g} = \dot{\sigma}_g \geq 0, \quad \sum_\alpha \dot{\sigma}_\alpha = \dot{\sigma} \geq 0,$$

en correspondencia con la inecuación de Clausius estándar. Obsérvese que, aun en estado estacionario ($\partial_t S_g = 0$ o $\partial_t S = 0$), los términos $\dot{S}^{\alpha,g}$ y \dot{S}^α no tienen por qué anularse: dependen de los flujos locales que entran por cada disipador.

Introducimos ahora las corrientes de energía y la potencia química asociadas a cada reservorio,

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,g} &= \text{Tr}[(\mathcal{L}_{\alpha,g}\hat{\rho}_S)\hat{H}_S], & \dot{E}_\alpha &= \text{Tr}[(\mathcal{L}_\alpha\hat{\rho}_S)\hat{H}_{TD}], \\ \dot{W}_{\alpha,g} &= \mu_\alpha \text{Tr}[(\mathcal{L}_{\alpha,g}\hat{\rho}_S)\hat{N}_S], & \dot{W}_\alpha &= \mu_\alpha \text{Tr}[(\mathcal{L}_\alpha\hat{\rho}_S)\hat{N}_S]. \end{aligned}$$

Para ambas ecuaciones maestras (global y semilocal) se cumple que la suma de las corrientes de energía provenientes de los distintos reservorios coincide con la derivada temporal de la energía interna del sistema:

$$\sum_\alpha \dot{E}_{\alpha,g} = \partial_t E_g, \quad \sum_\alpha \dot{E}_\alpha = \partial_t E.$$

En ausencia de trabajo mecánico (Hamiltoniano independiente del tiempo), la energía intercambiada con cada reservorio se descompone como

$$\dot{E}_{\alpha,g} = J_{\alpha,g} + \dot{W}_{\alpha,g}, \quad \dot{E}_\alpha = J_\alpha + \dot{W}_\alpha.$$

Multiplicando (3.6) por $T_\alpha = \beta_\alpha^{-1}$ y utilizando la descomposición de energía dada en la expresión anterior, se obtienen las inecuaciones locales de energía libre:

$$T_\alpha \dot{\sigma}_{\alpha,g} = \dot{W}_{\alpha,g} - \dot{\mathcal{F}}_{\alpha,g} \geq 0, \quad T_\alpha \dot{\sigma}_\alpha = \dot{W}_\alpha - \dot{\mathcal{F}}_\alpha \geq 0, \quad (3.7)$$

donde las tasas de variación de energía libre asociadas al reservorio α se definen como

$$\dot{\mathcal{F}}_{\alpha,g} = \dot{E}_{\alpha,g} - T_\alpha \dot{S}^{\alpha,g}, \quad \dot{\mathcal{F}}_\alpha = \dot{E}_\alpha - T_\alpha \dot{S}^\alpha.$$

Al sumar sobre todos los reservorios se obtiene, para los casos global y semilocal,

$$\sum_{\alpha} T_{\alpha} \dot{\sigma}_{\alpha,g} = \dot{W}_g - \dot{\mathcal{F}}_g \geq 0, \quad \sum_{\alpha} T_{\alpha} \dot{\sigma}_{\alpha} = \dot{W} - \dot{\mathcal{F}} \geq 0, \quad (3.8)$$

con $\dot{W}_g = \sum_{\alpha} \dot{W}_{\alpha,g}$, $\dot{W} = \sum_{\alpha} \dot{W}_{\alpha}$ y

$$\dot{\mathcal{F}}_g = \partial_t E_g - \sum_{\alpha} T_{\alpha} \dot{S}^{\alpha,g}, \quad \dot{\mathcal{F}} = \partial_t E - \sum_{\alpha} T_{\alpha} \dot{S}^{\alpha}.$$

En el caso isotérmico ($T_{\alpha} = T$ para todo α), las tasas de energía libre se reducen a $\dot{\mathcal{F}}_g = \partial_t(E_g - TS_g)$ y $\dot{\mathcal{F}} = \partial_t(E - TS)$, por lo que las ecuaciones (3.6) y (3.8) son equivalentes. En estado estacionario, $\dot{\mathcal{F}}_g = \dot{\mathcal{F}} = 0$; por tanto, $\dot{W}_g \geq 0$ y $\dot{W} \geq 0$. En consecuencia, el sistema no puede entregar trabajo neto si únicamente intercambia calor con reservorios a la misma temperatura. La extracción de trabajo neto (signo opuesto en nuestras convenciones) requiere la presencia de reservorios a distintas temperaturas, caso en el cual $\dot{\mathcal{F}}_g \neq 0$ y $\dot{\mathcal{F}} \neq 0$.

3.6. Flujos de información en sistemas cuánticos

En esta sección, el análisis de los flujos de información se desarrollará en el marco de la evolución semilocal, ya que este será el esquema utilizado en el resto de la tesis. Para el caso de evolución global, los flujos de información pueden definirse de manera análoga, empleando las cantidades termodinámicas correspondientes a dicho marco.

Consideremos un sistema S compuesto por dos subsistemas acoplados, cuya dinámica está gobernada por un Hamiltoniano de la forma

$$\hat{H}_S = \hat{H}_X + \hat{H}_Y + \hat{H}_{XY},$$

donde \hat{H}_i representa el Hamiltoniano del subsistema $i = X, Y$, y \hat{H}_{XY} corresponde al término de interacción entre ambos subsistemas. Se asume, además, que cada subsistema está acoplado a un conjunto distinto de reservorios, denotados por α_i . Bajo esta hipótesis, la tasa de producción de entropía local de cada subsistema i está dada por

$$\dot{\sigma}_i \equiv \sum_{\alpha_i} \dot{\sigma}_{\alpha_i} = \sum_{\alpha_i} \dot{S}^{\alpha_i} - \sum_{\alpha_i} \beta_{\alpha_i} J_{\alpha_i} \geq 0,$$

de modo que la tasa de producción de entropía total del sistema se expresa como $\dot{\sigma} = \dot{\sigma}_X + \dot{\sigma}_Y$.

De forma análoga a la descripción clásica, se busca establecer un vínculo entre las producciones locales de entropía y la información compartida entre subsistemas. Para ello, se emplea la información mutua cuántica, definida como

$$I_{XY} = S_X + S_Y - S_{XY},$$

donde $S_{XY} = -\text{Tr}\{\hat{\rho}_S \ln \hat{\rho}_S\}$ es la entropía de von Neumann del sistema total, y $S_i = -\text{Tr}\{\hat{\rho}_i \ln \hat{\rho}_i\}$ corresponde a la entropía del subsistema $i = X, Y$, con $\hat{\rho}_i$ la matriz densidad reducida asociada.

La derivada temporal de la información mutua puede descomponerse como

$$\begin{aligned}
\partial_t I_{XY} &= \partial_t S_X + \partial_t S_Y - \partial_t S_{XY} \\
&= \partial_t S_X + \partial_t S_Y - \sum_{i=X,Y;\alpha_i} \dot{S}^{\alpha_i} \\
&= \partial_t S_X - \sum_{\alpha_X} \dot{S}^{\alpha_X} + \partial_t S_Y - \sum_{\alpha_Y} \dot{S}^{\alpha_Y} \\
&= \dot{I}_X + \dot{I}_Y,
\end{aligned}$$

donde el flujo de información asociado a cada subsistema i se define como

$$\dot{I}_i = \partial_t S_i - \sum_{\alpha_i} \dot{S}^{\alpha_i}.$$

Al sustituir $\sum_{\alpha_i} \dot{S}^{\alpha_i} = \partial_t S^i - \dot{I}_i$ en las expresiones para las producciones de entropía locales, se obtiene

$$\dot{\sigma}^X = \partial_t S^X - \sum_{\alpha_X} \beta_{\alpha_X} J_{\alpha_X} - \dot{I}_X \geq 0, \quad (3.9)$$

$$\dot{\sigma}^Y = \partial_t S^Y - \sum_{\alpha_Y} \beta_{\alpha_Y} J_{\alpha_Y} - \dot{I}_Y \geq 0. \quad (3.10)$$

Este resultado es análogo al obtenido en la descripción clásica; sin embargo, al estar formulado en términos de entropías de von Neumann permite incorporar de manera natural efectos cuánticos, como las correlaciones y coherencias, que resultan esenciales para la caracterización de los flujos de información en sistemas cuánticos.

Si el subsistema i está acoplado a un reservorio isotérmico de temperatura T_i , la tasa de cambio de energía libre se escribe como

$$\dot{\mathcal{F}}_i = \dot{E}_i - T_i \sum_{\alpha_i} \dot{S}^{\alpha_i}.$$

En el estado estacionario se cumple

$$\dot{I}_i = - \sum_{\alpha_i} \dot{S}^{\alpha_i},$$

por lo que la tasa de variación de energía libre del subsistema i toma la forma

$$\dot{\mathcal{F}}_i = \dot{E}_i + T_i \dot{I}_i.$$

Así, la variación de energía libre presenta dos contribuciones: una asociada al intercambio de energía y otra vinculada al flujo de información. En consecuencia, la potencia asociada al subsistema i se encuentra acotada por

$$\dot{W}_i \geq \dot{E}_i + T_i \dot{I}_i.$$

Esta cota muestra que la capacidad del subsistema i para realizar trabajo externo depende no sólo del intercambio energético, sino también del flujo de información que reciba.

En régimen estacionario, la energía total permanece constante,

$$\partial_t E = \dot{E}_X + \dot{E}_Y = 0,$$

lo que permite interpretar los términos \dot{E}_i como flujos de energía entre subsistemas. En este contexto, la variación de energía libre de cada subsistema se descompone en dos partes: una correspondiente al intercambio energético y otra asociada al flujo de información generado por sus correlaciones mutuas.

En el caso particular $\dot{E}_X = \dot{E}_Y \approx 0$, la cota para la potencia se reduce a

$$\dot{W}_i \geq T_i \dot{I}_i.$$

Cuando $\dot{I}_i < 0$, esta relación permite que el sistema realice trabajo a partir de una contribución dominante de la información, incluso en ausencia de gradientes térmicos apreciables. Este mecanismo constituye lo que se denomina una *máquina de información*, en la que los flujos informacionales entre subsistemas desempeñan un papel central, posibilitando la extracción de trabajo en un régimen puramente informacional.

Estos flujos de información y su influencia en la termodinámica de sistemas cuánticos serán explorados en detalle en el capítulo siguiente, donde se analizará un modelo específico que exhibe el comportamiento característico de un Demonio de Maxwell autónomo.

Capítulo 4

Dinámica de un sistema de 3 puntos cuánticos conectado al ambiente

En este capítulo se estudia un sistema compuesto por tres puntos cuánticos acoplados a múltiples reservorios térmicos. La evolución del sistema se analiza mediante la ecuación de Lindblad desarrollada en la sección 2.12. En la sección 4.3 se introduce el Hamiltoniano del sistema reducido y su entorno. Posteriormente, en la sección 4.4.1, se analiza el comportamiento del sistema en un escenario típico de transporte cuántico. En la sección 4.4.2, se establecen las condiciones bajo las cuales la dinámica del sistema puede interpretarse como la de un Demonio de Maxwell autónomo. Finalmente, en la sección 4.4.3, se compara este comportamiento con su contraparte clásica, destacando las diferencias inducidas por los efectos cuánticos.

4.1. Puntos cuánticos

Uno de los sistemas físicos a nanoescala más estudiados en el contexto de la termodinámica cuántica y el transporte electrónico son los puntos cuánticos. Estos sistemas, que pueden fabricarse mediante técnicas de litografía o autoensamblaje, consisten en regiones semiconductoras diminutas donde los electrones están confinados en las tres dimensiones espaciales en una región del orden de 100[nm][49]. Debido a su tamaño reducido, los puntos cuánticos exhiben propiedades electrónicas discretas, similares a las de los átomos, lo que les ha valido el sobrenombre de "átomos artificiales"[50]. Tal como en los átomos reales, los electrones son atraídos hacia una localización central que suele ser un núcleo positivo, para el átomo artificial es el potencial de confinamiento creado por las heteroestructuras semiconductoras[51]. De manera análoga, un átomo real posee energía de ionización, el punto cuántico posee una energía de carga, que es la energía necesaria para añadir un electrón adicional al punto cuántico y agregarlo el potencial dentro de la barrera, esta energía corresponde a la energía de sitio para un punto cuántico de un electrón. Estos puntos cuánticos pueden ser conectados a reservorios, a través de barreras de tunel.

En la Figura 4.1 se muestra un esquema de un punto cuántico de un electrón definido electrostáticamente en una heteroestructura semiconductor hecha de capas de AlGaAs y GaAs. En este caso, los electrones quedan confinados en una región pequeña, dando lugar a niveles de energía discretos.

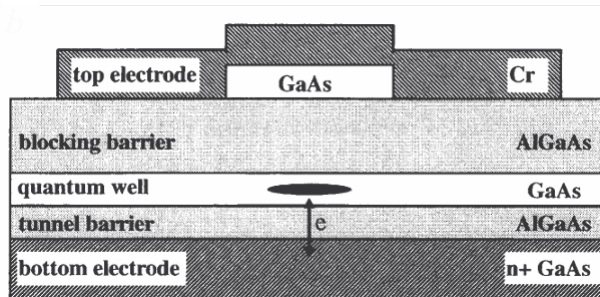


Figura 4.1: Esquema de un punto cuántico definido electrostáticamente en una heteroestructura semiconductor. Los electrones quedan confinados en una región pequeña, dando lugar a niveles de energía discretos. Figura adaptada de [51].

4.2. Modelo teórico

Con el fin de extender el modelo estudiado en [13] a un contexto cuántico, se considera un sistema reducido compuesto por tres puntos cuánticos acoplados a tres reservorios térmicos, como se ilustra en la Figura 4.2. Uno de los puntos posee una energía de sitio ϵ_D y se encuentra acoplado, mediante una interacción de Coulomb U , a los otros dos puntos cuánticos. Estos últimos tienen una energía de sitio ϵ y están conectados entre sí por un término de *hopping* g , que permite el transporte de electrones entre los sitios L y R . Además, interactúan mediante una energía de Coulomb U_f . Cada nivel de energía está acoplado a un baño térmico distinto.

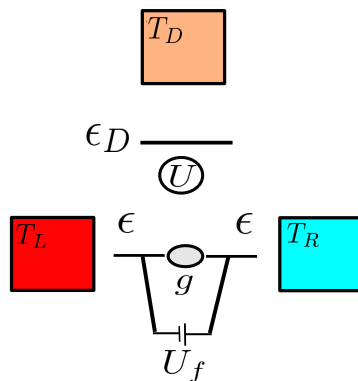


Figura 4.2: Esquema del sistema reducido compuesto por tres puntos cuánticos, modelados como tres niveles de energía. Estos niveles presentan interacción de Coulomb repulsiva entre sí y cada uno está acoplado a un baño térmico distinto.

La elección de este sistema se justifica por su capacidad para exhibir un comportamiento característico de un Demonio de Maxwell autónomo, análogo al modelo clásico presentado en [13]. En este marco, el punto cuántico con energía ϵ_D actúa como el “Demonio”, mientras que los puntos con energía ϵ representan el “sistema” sobre el cual se ejerce control. La interacción entre los tres puntos cuánticos permite que el Demonio influya en el flujo de electrones entre L y R , posibilitando la extracción de trabajo.

Una manera de llevar a cabo dicha extracción consiste en aplicar un gradiente de potencial

eléctrico entre los puntos L y R , es decir, $\mu_L - \mu_R = eV$, lo que genera una corriente de electrones. Bajo ciertas condiciones, el Demonio puede invertir esta corriente, forzando a los electrones a fluir en contra del gradiente aplicado. Este efecto, que constituye una manifestación de trabajo extraído mediante información, se analiza con mayor detalle en la sección 4.3.1.

Finalmente, el acoplamiento coherente introducido por el término de *hopping* g da lugar a efectos cuánticos adicionales, como la coherencia entre los niveles L y R . Estas coherencias pueden modificar la dinámica del sistema y afectar la eficiencia del Demonio.

En la siguiente sección se estudiará la dinámica del sistema mediante la ecuación maestra de Lindblad semilocal, explorando las condiciones bajo las cuales se manifiesta un comportamiento consistente con el de un Demonio de Maxwell autónomo.

4.3. Ecuación maestra de un sistema de tres puntos cuánticos

El Hamiltoniano del sistema reducido de tres puntos cuánticos se puede escribir en segunda cuantización como

$$\begin{aligned}\hat{H}_S = & \epsilon_D \hat{n}_D + \epsilon_L \hat{n}_L + \epsilon_R \hat{n}_R + g(\hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R + \hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L) \\ & + U(\hat{n}_D \hat{n}_L + \hat{n}_D \hat{n}_R) + U_f \hat{n}_R \hat{n}_L,\end{aligned}$$

donde $\hat{n}_i = \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_i$ es el operador número del sitio i , y los operadores \hat{d}_i satisfacen las relaciones de anticonmutación

$$\{\hat{d}_\alpha, \hat{d}_\beta\} = 0, \quad \{\hat{d}_\alpha^\dagger, \hat{d}_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}.$$

Las cantidades $\epsilon_D, \epsilon_L, \epsilon_R$ corresponden a las energías de ocupación de los puntos cuánticos D, L, R , respectivamente. El parámetro g describe el acoplamiento de *hopping* entre los puntos L y R , análogo al acoplamiento entre orbitales atómicos[52]. El término U representa la interacción de Coulomb repulsiva entre el punto D y los puntos L, R , mientras que U_f corresponde a la interacción de Coulomb repulsiva entre L y R .

En la base de Fock $|n_L, n_R, n_D\rangle = (\hat{d}_L^\dagger)^{n_L} (\hat{d}_R^\dagger)^{n_R} (\hat{d}_D^\dagger)^{n_D} |0, 0, 0\rangle$, ordenada como

$$\{|0, 0, 0\rangle, |1, 0, 0\rangle, |0, 1, 0\rangle, |0, 0, 1\rangle, |1, 1, 0\rangle, |1, 0, 1\rangle, |0, 1, 1\rangle, |1, 1, 1\rangle\},$$

el Hamiltoniano toma la forma matricial

$$\hat{H}_S = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_L & g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g & \epsilon_R & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_D & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_L + \epsilon_R + U_f & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_L + \epsilon_D + U & g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g & \epsilon_R + \epsilon_D + U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_L + \epsilon_R + \epsilon_D + 2U + U_f \end{bmatrix}.$$

Esta representación permite identificar que el término de *hopping* g es el único que introduce coherencias en la base de Fock, acoplando los estados $|1, 0, 0\rangle \leftrightarrow |0, 1, 0\rangle$ y $|1, 0, 1\rangle \leftrightarrow |0, 1, 1\rangle$. El resto de términos son puramente diagonales y describen las energías de cada configuración de ocupación.

El Hamiltoniano total incluye, además, los términos de los reservorios y la interacción sistema-baño: $\hat{H}_B = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_D$ y $\hat{V} = \hat{V}_L + \hat{V}_R + \hat{V}_D$, con

$$\hat{H}_\alpha = \sum_l \epsilon_{\alpha,l} \hat{c}_{\alpha,l}^\dagger \hat{c}_{\alpha,l}, \quad \hat{V}_\alpha = \sum_l t_{\alpha,l} \left(\hat{d}_\alpha^\dagger \hat{c}_{\alpha,l} + \hat{c}_{\alpha,l}^\dagger \hat{d}_\alpha \right),$$

donde $\alpha = L, R, D$ denota los tres reservorios, $\hat{c}_{\alpha,l}$ son los operadores de aniquilación de los modos del reservorio α , $\epsilon_{\alpha,l}$ sus energías, y $t_{\alpha,l}$ los parámetros reales de acoplamiento.

De \hat{V} se identifican los operadores de sistema y baño como

$$\hat{S}_{\alpha,1} = \hat{d}_\alpha^\dagger, \quad \hat{S}_{\alpha,-1} = \hat{d}_\alpha,$$

$$\hat{B}_{\alpha,1} = \sum_l t_{\alpha l} \hat{c}_{\alpha l}, \quad \hat{B}_{\alpha,-1} = \sum_l t_{\alpha l} \hat{c}_{\alpha l}^\dagger.$$

La evolución no unitaria del sistema de tres puntos cuánticos, inducida por el acoplamiento a los reservorios, se describe mediante la ecuación maestra de Lindblad:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_R + \mathcal{L}_L + \mathcal{L}_D, \quad (4.1)$$

donde cada disipador \mathcal{L}_i depende de los operadores locales del sitio y toma la forma explícita que se presenta en los apéndices C.2 y C.3. Las funciones de Fermi $f_i(\omega) = \left(e^{\beta_i(\omega - \mu_i)} + 1 \right)^{-1}$ y las tasas de túnel $\kappa_\alpha(\omega) = 2\pi \sum_l t_{\alpha l}^2 \delta(\omega - \epsilon_{\alpha,l})$ se obtienen a partir de las funciones de correlación espectral discutidas en 2.10.

Despreciando el término de *Lamb Shift* \hat{H}_{LS} , como se realiza en [23], la evolución del sistema está gobernada por

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t)] + \mathcal{L}(\hat{\rho}_S(t)), \quad (4.2)$$

donde $\hat{\rho}_S(t)$ es la matriz densidad del sistema reducido. Esta ecuación permite calcular numéricamente la dinámica y extraer las magnitudes termodinámicas de interés.

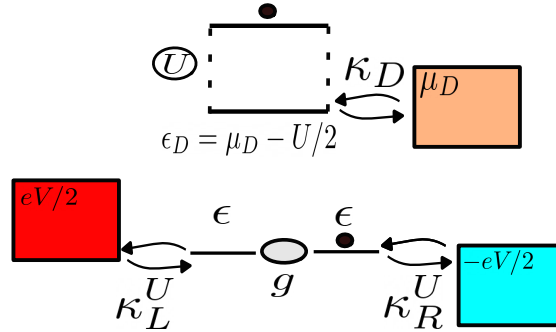
Un aspecto importante es que, en la descripción semilocal, los disipadores se construyen con operadores locales, lo cual facilita asignar cantidades termodinámicas a cada subsistema, en particular los flujos de información. En contraste, en la ecuación maestra global los disipadores dependen de operadores colectivos, lo que dificulta la interpretación local. Es crucial determinar bajo qué condiciones un Hamiltoniano \hat{H}_S conserva la localidad de los operadores tras la agrupación de frecuencias. Un ejemplo en el que esta condición no se cumple ocurre cuando las interacciones de Coulomb entre todos los sitios poseen valores distintos.

4.3.1. Explicación del Demonio de Maxwell autónomo

Para que el sistema de tres puntos cuánticos se comporte como un Demonio de Maxwell autónomo, es necesario tratarlo como un sistema bipartito compuesto por dos subsistemas: el subsistema LR , que consta de dos niveles de energía ϵ , y el subsistema D , cuyo nivel de energía ϵ_D desempeña el rol de demonio.

Esta retroalimentación se implementa matemáticamente imponiendo que las tasas de túnel cumplan la condición $\kappa_i(\epsilon + U) \neq \kappa_i(\epsilon)$, con $i = L, R$. En adelante, se utilizará la notación $\kappa_i^U \equiv \kappa_i(\epsilon + U)$ y $\kappa_i \equiv \kappa_i(\epsilon) = \kappa_i(\epsilon + U_f) = \kappa_i(\epsilon + U + U_f)$. Por el contrario, las tasas de túnel del demonio no dependen de la ocupación del sistema, de modo que se escriben simplemente como $\kappa_D \equiv \kappa_D(\epsilon_D)$.

La dinámica del demonio puede descomponerse en tres etapas, ilustradas en las Figuras 4.3–4.5.



En la primera etapa, la elección $\epsilon_D = \mu_D - U/2$ favorece la ocupación del nivel de energía del demonio. Para inducir una corriente en dirección opuesta al gradiente de potencial, es conveniente imponer que $\kappa_R^U > \kappa_L^U$, de modo que las transiciones inducidas por el reservorio derecho sean más frecuentes, aumentando así la probabilidad de ocupación del demonio.

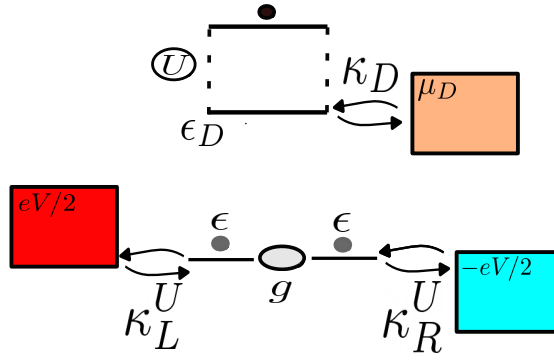


Figura 4.4: Segunda etapa: el *hopping* g genera una superposición coherente entre los sitios L y R , indicada mediante círculos grises.

En la segunda etapa, el acoplamiento g permite el intercambio coherente de electrones entre los niveles L y R . Este proceso introduce coherencias cuánticas que son esenciales para la dinámica del sistema.

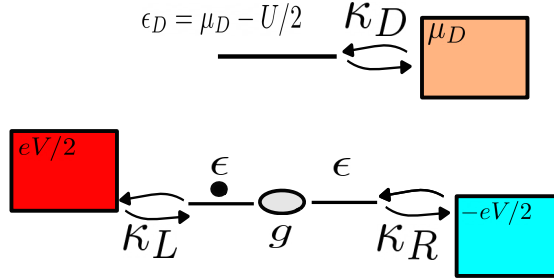


Figura 4.5: Tercera etapa: el electrón se transporta preferentemente hacia el reservorio L .

Finalmente, en la tercera etapa, con el objetivo de generar un flujo de corriente en contra del gradiente de potencial, resulta conveniente imponer que $\kappa_L > \kappa_R$. Esta condición garantiza que, cuando el demonio está desocupado, la probabilidad de transición hacia el reservorio L sea mayor que hacia el reservorio R . Como consecuencia, se favorece el transporte de electrones desde el reservorio R (de menor potencial) hacia el reservorio L (de mayor potencial), lo que constituye un comportamiento característico de un Demonio de Maxwell autónomo.

4.4. Resultados

En esta sección se presentan los resultados numéricos obtenidos a partir de la resolución de la ecuación maestra de Lindblad semilocal para el sistema de tres puntos cuánticos. Se analizan dos escenarios: en primer lugar, un caso típico de transporte cuántico en el que las tasas de túnel son independientes de la ocupación del sitio D ; en segundo lugar, un caso en el que dichas tasas dependen de la ocupación, bajo condiciones en las que el sistema puede exhibir un comportamiento característico de un Demonio de Maxwell autónomo.

4.4.1. Estudio del transporte

Se aborda inicialmente el escenario en que las tasas de túnel no dependen de la ocupación y permanecen constantes, es decir, $\kappa_i(\omega) = \kappa_i$. En este caso se estudia el flujo de corriente

$$\dot{N}_i = \text{Tr}\{(\mathcal{L}_i \hat{\rho}_S) \hat{N}_S\},$$

generado por una diferencia de potencial $\mu_L - \mu_R = eV$, con $\mu_L = -\mu_R$. Para los cálculos se fijaron las tasas de túnel en $\kappa_L = \kappa_R = 1/100$ y $\kappa_D = 1/50$. Los resultados se muestran en la Figura 4.6.

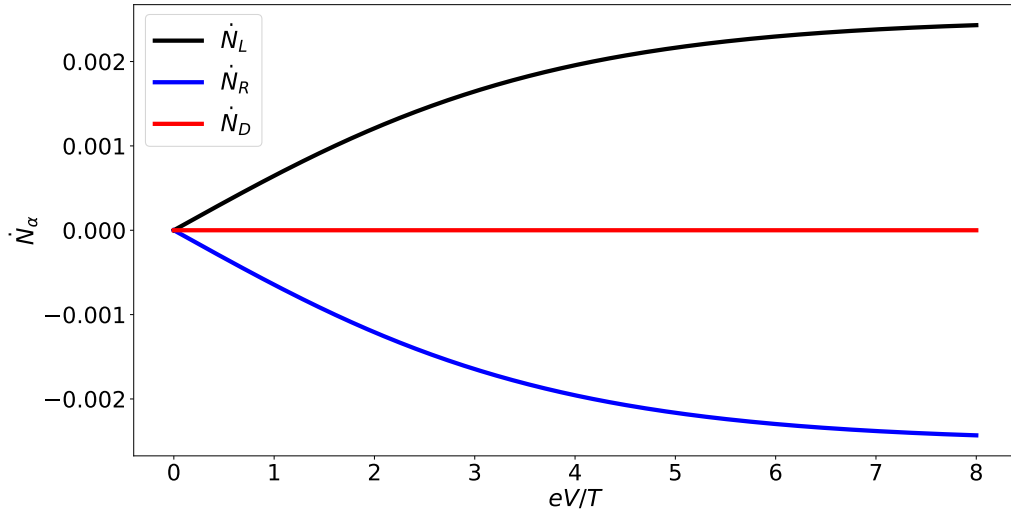


Figura 4.6: Corriente de partículas en función de la razón eV/T . Las temperaturas de los reservorios son $T_L = T_R = T = 100$ y $T_D = 2$. El parámetro de acoplamiento se fija en $g = \frac{5}{1000}$. Las energías de sitio corresponden a $\epsilon = 0$ y $\epsilon_D = \mu_D - \frac{U}{2}$, con $\mu_D = 2$. Las interacciones de Coulomb se fijan en $U_f = 500$ y $U = 40$.

La figura muestra que, a medida que aumenta la diferencia de potencial eV , la corriente de partículas $\dot{N}_L = -\dot{N}_R$ que fluye del baño L al baño R también crece. Este comportamiento es consistente con lo esperado, ya que un mayor potencial químico en el reservorio L impulsa el transporte hacia R .

La potencia suministrada al sistema, dada por la ecuación (2.14), se presenta en la Figura 4.7.

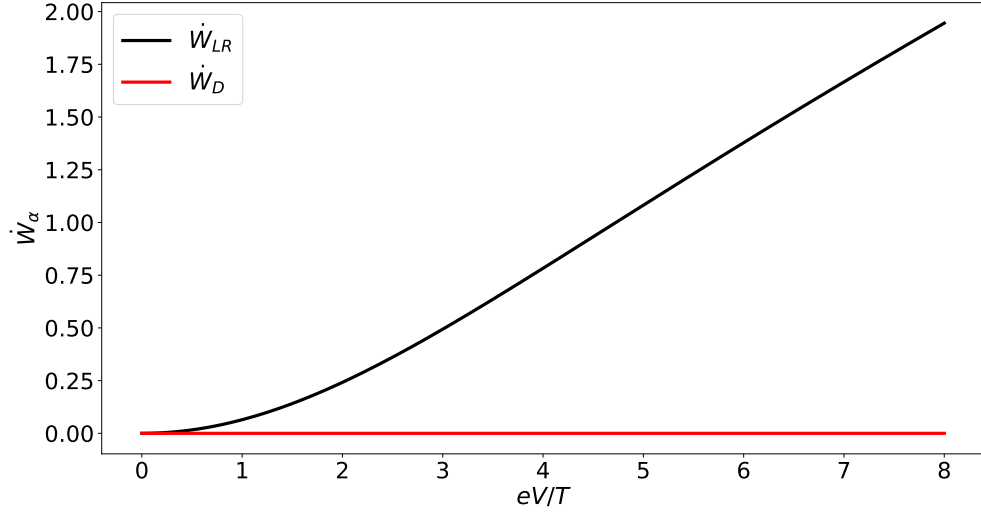


Figura 4.7: Potencia entregada por los reservorios en función de eV/T .

En la Figura 4.7 se observa que los reservorios L y R entregan trabajo al sistema para mantener la corriente de partículas. Este resultado concuerda con la interpretación física, ya que el transporte de electrones desde un potencial químico mayor hacia uno menor implica una transferencia de energía al sistema en forma de trabajo. Por su parte, dado que el reservorio D no intercambia partículas en promedio, la potencia asociada a este es nula.

Los flujos de calor definidos en la ecuación (2.14) se muestran en la Figura 4.8.

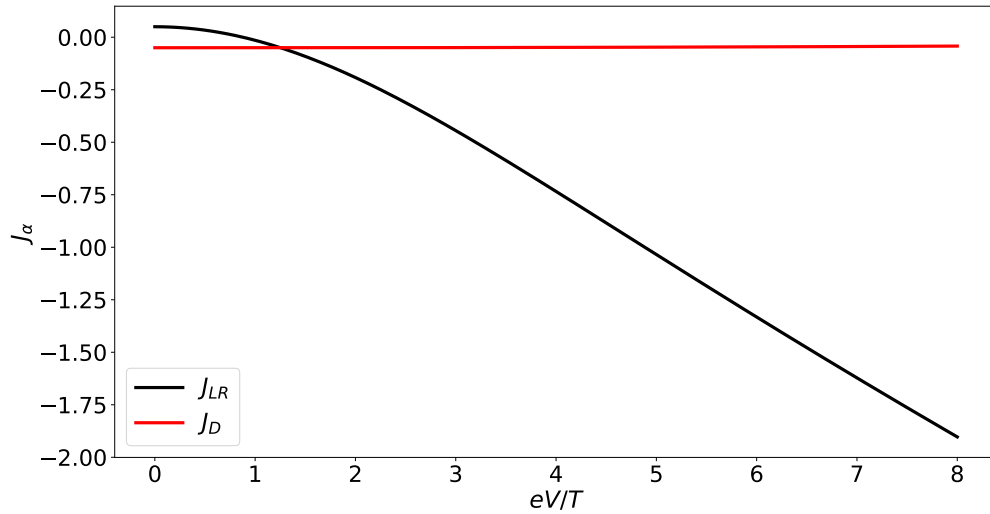


Figura 4.8: Flujo de calor recibido por los sistemas LR y D en función de eV/T .

Se observa que, para $eV/T \lesssim 2$, el sistema LR recibe calor de los reservorios L y R , mientras que para $eV/T \gtrsim 2$ este sistema entrega calor a dichos reservorios.

Para completar el análisis termodinámico, se utilizan las relaciones de la primera ley $\dot{E}_\alpha = J_\alpha + \dot{W}_\alpha$ (ec. (2.13)) y se grafican los flujos de energía en la Figura 4.9.

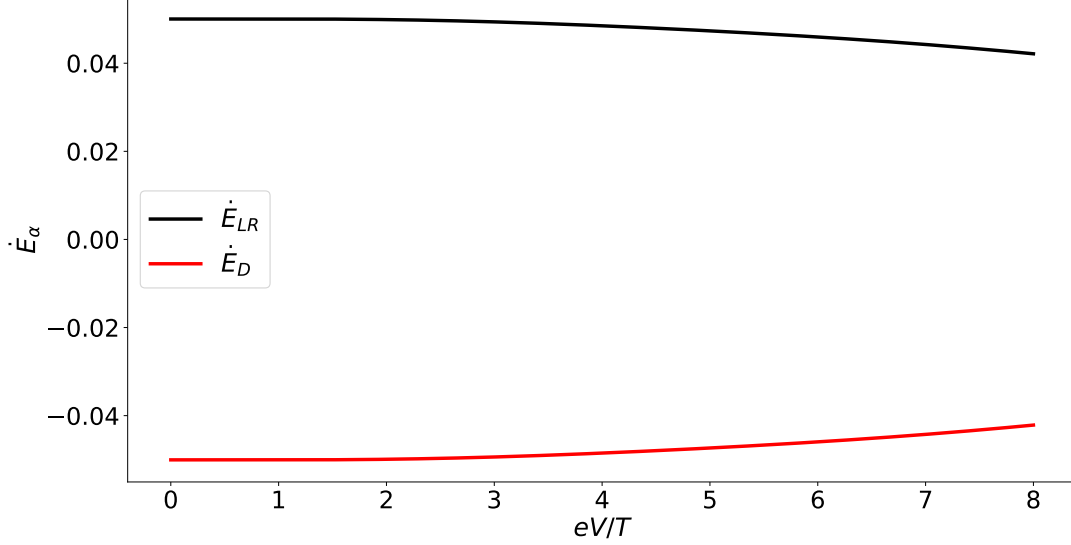


Figura 4.9: Flujo de energía entregado por los reservorios en función de eV/T .

En el estado estacionario, la condición $\partial_t E = 0$ implica que $\dot{E}_{LR} = -\dot{E}_D$. Esto se corrobora en la Figura 4.9, donde el flujo de energía \dot{E}_{LR} resulta positivo y \dot{E}_D negativo. Como $\dot{W}_D = 0$, se deduce que el flujo de calor hacia el demonio está dado por $J_D = \dot{E}_D < 0$, es decir, el reservorio D absorbe calor. En consecuencia, el sistema LR recibe energía de los reservorios L y R , la transfiere al subsistema D , y esta es finalmente disipada en su respectivo baño térmico. Este comportamiento concuerda con la primera ley de la termodinámica, ya que la energía suministrada por los reservorios de mayor temperatura ($T_L = T_R > T_D$) se conserva y fluye hacia el reservorio de menor temperatura.

Con el fin de analizar los efectos cuánticos en el estado estacionario, se calculan dos cantidades relevantes. La primera es la norma- l_1 , \mathcal{C}_{l_1} , que cuantifica las coherencias en el sistema LR :

$$\mathcal{C}_{l_1} = \sum_{i>j} |\hat{\rho}_{S;i,j}|.$$

La segunda cantidad corresponde al entrelazamiento entre modos específicos. En particular, se estudia el entrelazamiento entre los pares de estados $\{|1, 0, 0\rangle, |0, 1, 0\rangle\}$ y $\{|1, 0, 1\rangle, |0, 1, 1\rangle\}$. Para cuantificar estas correlaciones no clásicas se utiliza la concurrencia \mathcal{C}_{on} [53, 54], definida como

$$\mathcal{C}_{\text{on}} = \max \{2|\alpha + \beta| - 2\sqrt{p_0 p_D}, 0\},$$

donde p_0 y p_D representan las probabilidades de que el sistema LR se encuentre vacío o doblemente ocupado, respectivamente. El término α corresponde a la coherencia entre los estados $|1, 0, 0\rangle$ y $|0, 1, 0\rangle$, mientras que β representa la coherencia entre los estados $|1, 0, 1\rangle$ y $|0, 1, 1\rangle$. La deducción de esta expresión se presenta en el Apéndice C.6.

En la Figura 4.10 se ilustra la variación de la coherencia y la concurrencia en función de la diferencia de potencial.

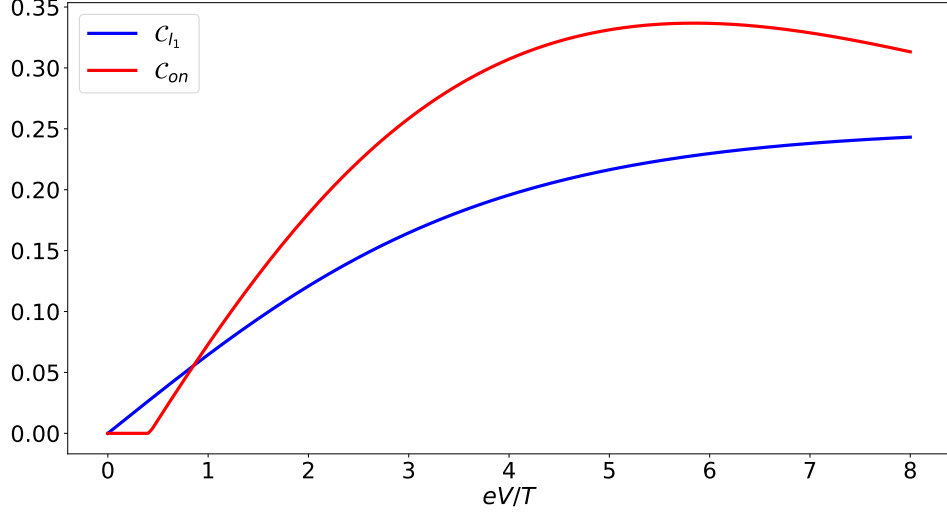


Figura 4.10: Coherencia (línea azul) y concurrencia (línea roja) en función de eV/T .

Los resultados muestran que la coherencia comienza en cero y aumenta de forma progresiva con la diferencia de potencial. En cuanto al entrelazamiento, este también es nulo al inicio y permanece así hasta superar un umbral, a partir del cual la concurrencia crece con eV/T . Esto indica la aparición de entrelazamiento en el sistema LR . Este resultado es relevante, ya que sugiere que la presencia de una corriente favorece el desarrollo de coherencia y entrelazamiento entre los sitios L y R .

4.4.2. Demonio de Maxwell en 3 puntos cuánticos

En esta subsección se eligen distintos candidatos para las tasas de túnel con el objetivo de inducir un comportamiento tipo Demonio de Maxwell. Para ello, se estudiará el comportamiento de la matriz densidad, así como los flujos de corriente de partículas, calor, información y potencia, en función de la diferencia de potencial $\mu_L - \mu_R = eV$.

Se comenzará analizando las probabilidades de ocupación, extraídas de la matriz densidad en el estado estacionario. Como se muestra en la Figura 4.11, las tres probabilidades más altas corresponden a los estados ρ_{001} , ρ_{100} y ρ_{010} , lo cual es coherente con la presencia de interacción de Coulomb, que penaliza las configuraciones con ocupación múltiple.

Para valores de $eV/T \lesssim 3.6$, la probabilidad más alta corresponde al estado ρ_{001} , lo que indica que el sitio D es, en promedio, el más ocupado. Sin embargo, a medida que la diferencia de potencial aumenta ($eV/T \gtrsim 3.6$), las probabilidades asociadas a los estados ρ_{100} y ρ_{010} —correspondientes a los sitios L y R — superan a ρ_{001} , lo que refleja un cambio en la ocupación predominante del sistema.

Debido a que la interacción de Coulomb penaliza los estados con más de un electrón, cabría esperar que la probabilidad de vacío ρ_{000} fuese del mismo orden de magnitud que $\rho_{100}, \rho_{010}, \rho_{001}$. Sin embargo, debido a la constante inyección de partículas inducida por la diferencia de potencial, esta probabilidad resulta ser significativamente menor.

Se observa además un cruce entre las curvas de ρ_{101} y ρ_{011} en $eV/T \approx 2.4$. Para valores $eV/T \lesssim 2.4$, la configuración con interacción Coulomb entre los puntos R y D (representada por ρ_{011}) es más probable que ρ_{101} , esto favorece a que el sistema se encuentre en la confi-

guración de la Figura 4.3, y por lo tanto es esperable que favorezca el comportamiento tipo Demonio. En cambio, para $eV/T \gtrsim 2.4$, la ocupación ρ_{011} se hace menos probable, indicando una menor interacción entre los sitios R y D , por lo tanto se suprime el comportamiento tipo Demonio.

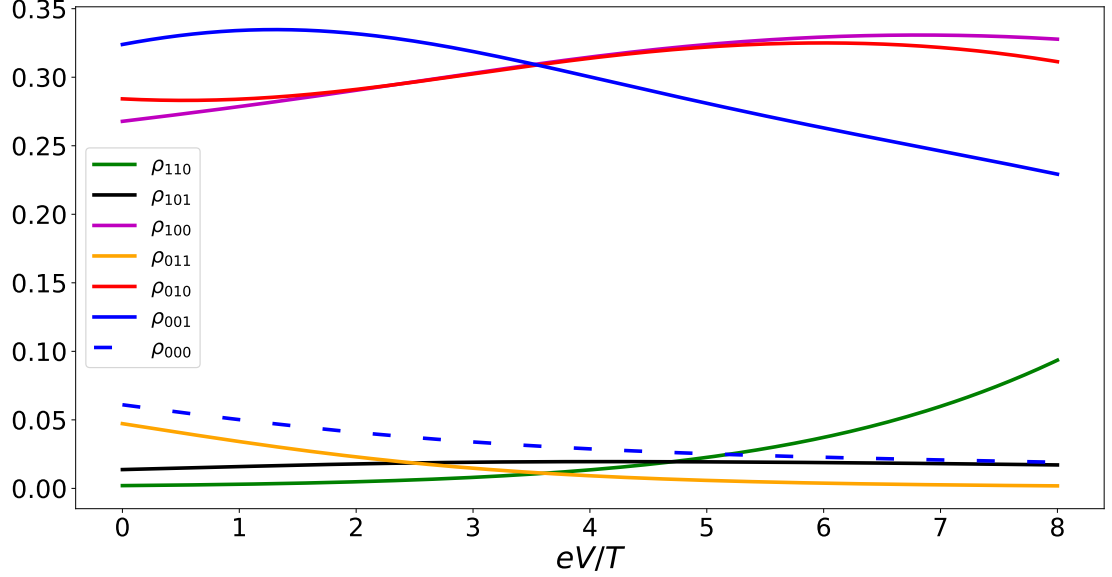


Figura 4.11: Elementos diagonales de la matriz densidad en función de eV/T .

El comportamiento de un Demonio de Maxwell autónomo se puede corroborar analizando las cantidades termodinámicas del sistema. En la Figura 4.12 se muestran: (a) los flujos de calor correspondientes a cada reservorio, y (b) las corrientes de partículas asociadas. Cabe destacar que, dado que no existe un término de hopping entre el sistema y el demonio, la corriente de partículas en el demonio es nula, $\dot{N}_d = 0$. Además, por conservación de partículas, se cumple que $\dot{N}_L = -\dot{N}_R$, lo cual implica que la influencia del demonio sobre el sistema ocurre exclusivamente a través de flujos de energía o información.

Existe un régimen $eV/T \lesssim 2.4$ donde el sistema LR recibe calor de los reservorios L y R , es decir, $J_L, J_R > 0$. En este mismo régimen, el demonio disipa calor en su respectivo reservorio, $J_D < 0$. Este comportamiento es consistente con la interpretación física del demonio.

Dado que $\mu_L - \mu_R = eV$, se esperaría que $\dot{N}_L > 0$ para todo valor de eV . No obstante, en el régimen $eV/T \lesssim 2.4$, se observa que $\dot{N}_L < 0$, lo que indica un flujo de partículas en contra del gradiente de potencial. Este cambio de signo en la corriente coincide con el cruce entre las probabilidades ρ_{101} y ρ_{011} , lo que es consistente con el comportamiento de Demonio de Maxwell. En particular, como se ilustró en la Figura 4.3, dicho régimen requiere una interacción simultánea entre los puntos R y D .

Si se analiza únicamente el subsistema LR , la existencia de una corriente contra el gradiente químico representa una violación aparente de la segunda ley de la termodinámica. Para este análisis, se considera la tasa de producción de entropía efectiva del subsistema en el estado estacionario, dada por $\dot{\sigma}_{LR}^o = -\sum_{i=L,R} J_i/T$, cuya evolución en función de eV/T se muestra en la Figura 4.13.

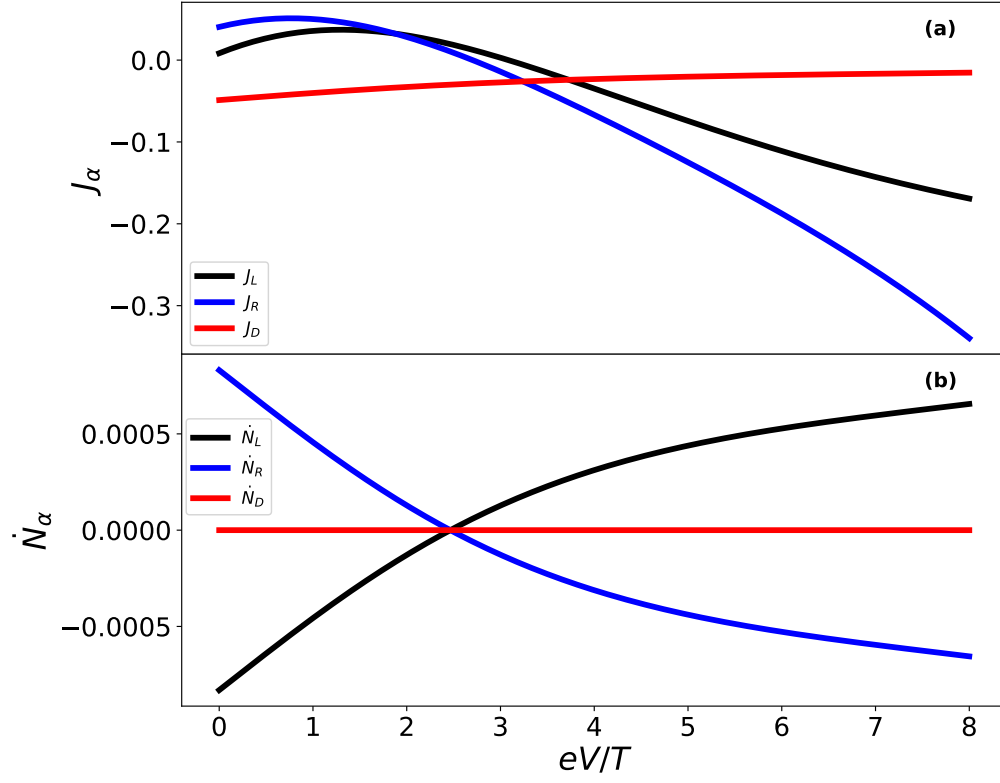


Figura 4.12: (a) Flujos de calor liberados por cada reservorio α . (b) Flujos de corriente de partículas correspondientes a cada reservorio. Los resultados se obtuvieron considerando temperaturas $T = 100$ y $T_D = 2$, niveles de energía $\epsilon = 0$ y $\epsilon_D = \mu_D - U/2$ con potencial químico $\mu_D = 2$, tasas de túnel $\kappa_L = \kappa_R^U = 1/100$, $\kappa_R = \kappa_L^U = 1/600$, $\kappa_D = 1/50$, acoplamiento entre los sitios $g = 5/1000$ e interacciones de Coulomb $U = 40$ y $U_f = 500$.

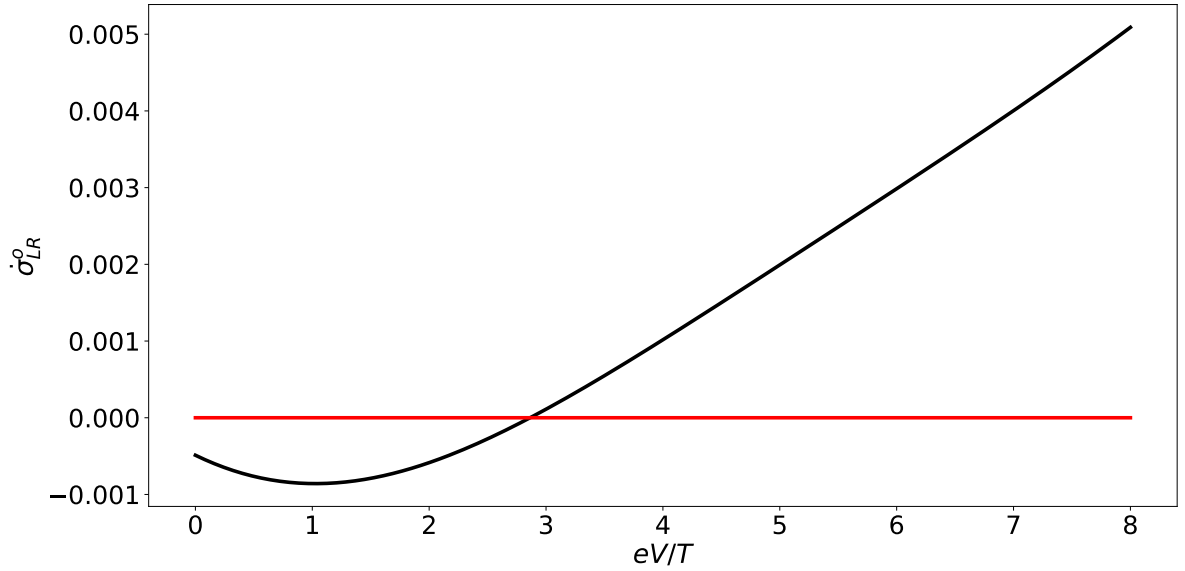


Figura 4.13: Tasa de producción de entropía aparente del sistema $LR(\dot{\sigma}_{LR}^o)$ en función de eV/T .

Donde se observa que para $eV/T \lesssim 3$, la tasa de producción de entropía aparente $\dot{\sigma}_{LR}^o$ es menor a cero, lo que implica una violación aparente de la segunda ley de la termodinámica. Sin embargo, al incluir la contribución del flujo de información en el cálculo de la tasa de producción de entropía, dada por la ecuación (3.10), se obtiene la Figura 4.14, en la que se verifica que la producción total de entropía en el sistema LR permanece siempre positiva.

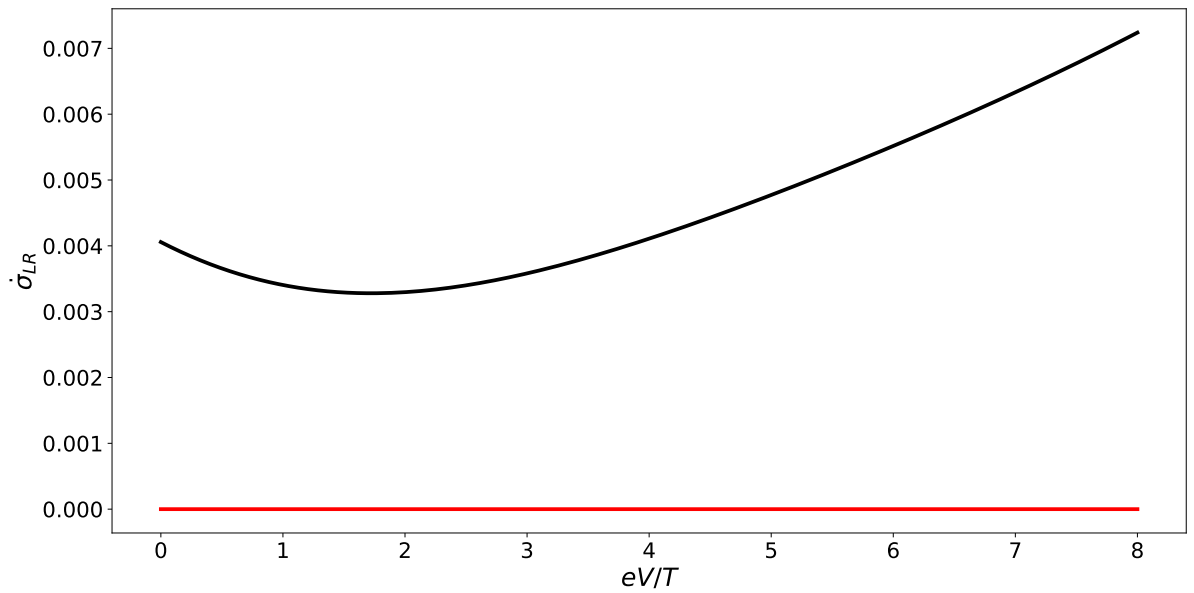


Figura 4.14: Tasa de producción de entropía del sistema $LR(\dot{\sigma}_{LR})$ en función de eV/T .

En el régimen de parámetros en que $eV/T \lesssim 2.4$, el subsistema LR realiza trabajo. Para determinar si este trabajo es impulsado principalmente por el flujo de información, es necesario analizar el intercambio energético entre el sistema y el demonio. En el estado estacionario, los flujos de energía cumplen $\dot{E}_{LR} = -\dot{E}_D$. Para que el sistema pueda interpretarse como un Demonio de Maxwell, el trabajo realizado por el subsistema LR debe estar dominado por la contribución informacional. Esta condición se puede expresar como:

$$\dot{\mathcal{F}}_{LR} = \dot{E}_{LR} + T\dot{I}_{LR} = -\dot{E}_D + T\dot{I}_{LR} \approx T\dot{I}_{LR}, \quad \dot{W}_{LR} \geq \dot{\mathcal{F}}_{LR},$$

donde $\dot{\mathcal{F}}_{LR}$ representa la tasa de cambio de energía libre del subsistema LR , incluyendo una contribución informacional $T\dot{I}_{LR}$.

A fin de verificar este comportamiento, se grafican las cantidades termodinámicas relevantes tanto del sistema como del demonio.

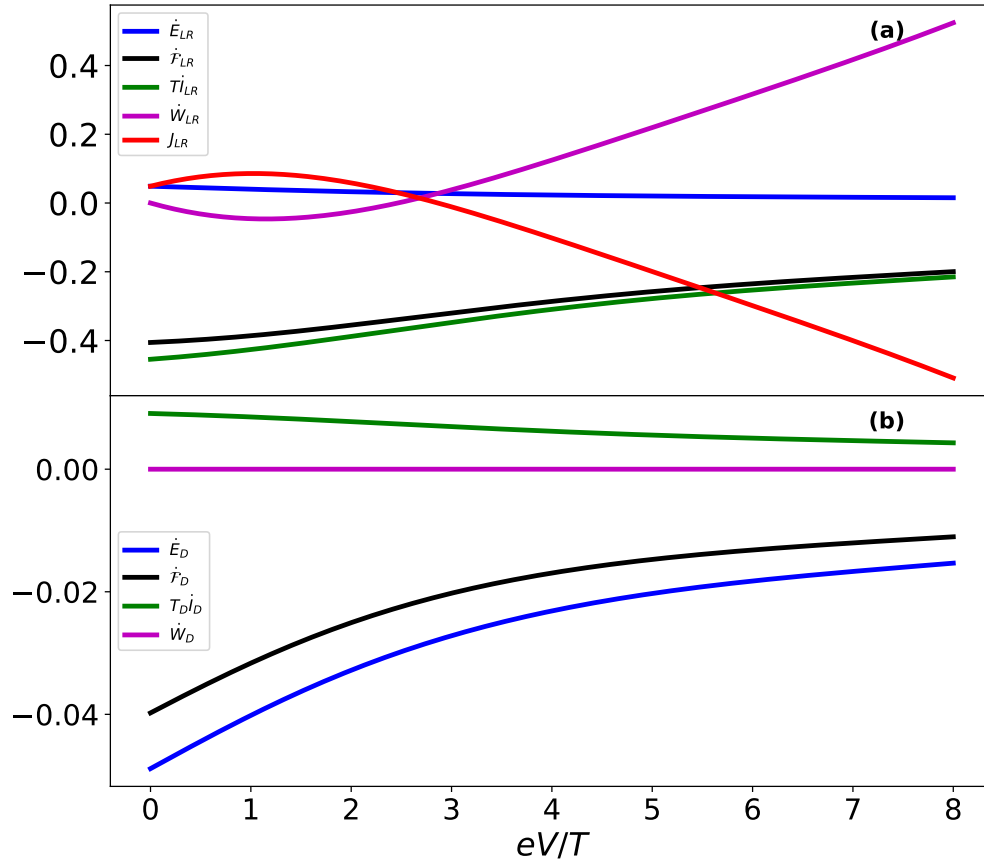


Figura 4.15: Flujo de energía, tasa de cambio de energía libre, flujo de información, potencia y flujo de calor del sistema LR . (b) Flujo de energía, tasa de cambio de energía libre, flujo de información y potencia del Demonio.

La Figura 4.15 muestra que, en el régimen en el que el subsistema LR realiza trabajo ($\dot{W}_{LR} < 0$ y $\dot{\mathcal{F}}_{LR} < 0$), la contribución informacional domina sobre el flujo energético, es decir, $\dot{\mathcal{F}}_{LR} \approx T\dot{I}_{LR}$ mientras que $\dot{E}_{LR} \approx 0$. Este resultado respalda la interpretación del dispositivo como un Demonio de Maxwell autónomo.

La potencia negativa $\dot{W}_{LR} < 0$ indica que el sistema está realizando trabajo en contra del gradiente de potencial, lo cual requiere absorber calor del entorno. En efecto, se verifica que

$J_{LR} > 0$, señalando que el subsistema LR extrae calor de sus respectivos reservorios.

Dado que no hay transporte neto de partículas a través del Demonio ($\dot{N}_D = 0$), el flujo de energía asociado se reduce a $J_D = \dot{E}_D$. Como se observa en la figura, $J_D < 0$, lo que implica que el Demonio disipa calor hacia su baño, caracterizado por una temperatura menor a los reservorios L y R ($T_D < T$).

Si se adopta una perspectiva global del sistema, es decir, considerando la termodinámica de los tres puntos cuánticos como un conjunto, este comportamiento puede interpretarse como el de una máquina térmica. En este escenario, el sistema total extrae calor del reservorio caliente (J_{LR}), convierte parte de esa energía en trabajo útil (\dot{W}_{LR}) y disipa el resto hacia el baño frío (J_D), cumpliendo así la relación $J_{LR} + J_D = -\dot{W}_{LR}$.

Al estar cada punto cuántico acoplado a un reservorio distinto, es posible descomponer el flujo de información total como $\dot{I}_{LR} = \dot{I}_L + \dot{I}_R$, lo que permite analizar la contribución informacional de cada punto cuántico por separado. Esta descomposición se ilustra en la Figura 4.16.

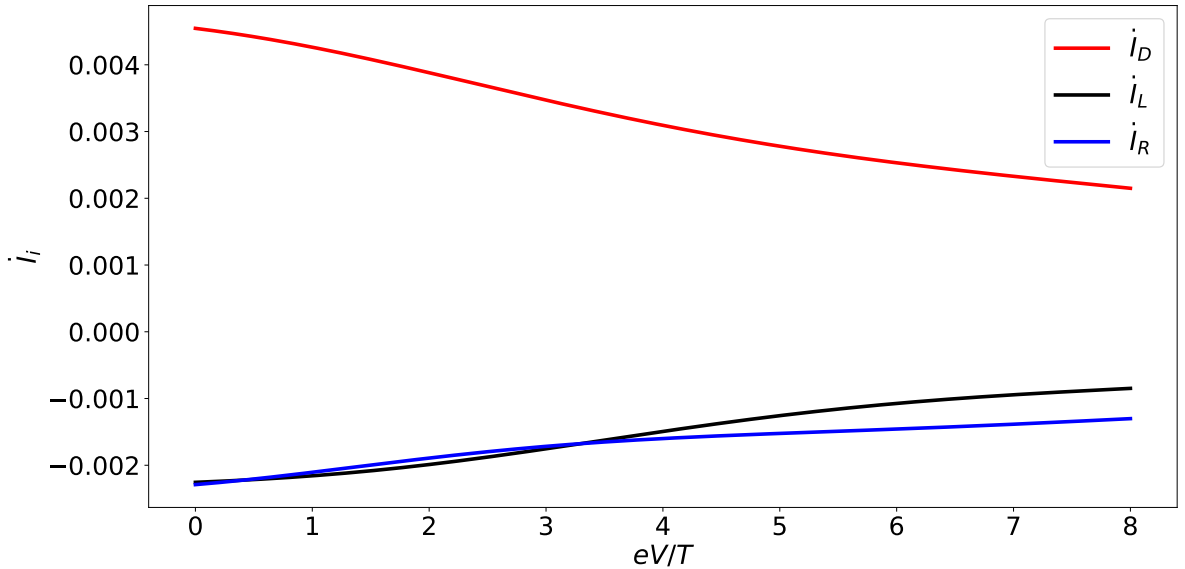


Figura 4.16: Flujos de información de cada sitio, L, R y D .

Es interesante notar que, cuando $eV/T \gtrsim 3.6$, el menor flujo de información corresponde al punto cuántico R , lo que implica que este entrega más información al sistema. En cambio, para $1 \lesssim eV/T \lesssim 3.6$, el flujo de información menor proviene del sitio L , de modo que este es el que aporta más información en ese rango. Esta transición se correlaciona con lo observado en la Figura 4.11: para $eV/T \gtrsim 3.6$ se cumple que $\rho_{001} < \rho_{010} < \rho_{100}$, lo que indica una mayor probabilidad de ocupación del sitio L . Además, en este mismo rango de parámetros ($eV/T \gtrsim 3.6$) la probabilidad del estado ρ_{110} supera a la de ρ_{011} , lo que implica que la ocupación simultánea de L y R —y por ende su monitoreo mutuo— es más probable que la de R y D . Lo anterior puede interpretarse como que, en este régimen, las correlaciones entre L y R se intensifican. Pues, en el estado ρ_{110} los sitios L y R interactúan mediante energía de Coulomb, siendo esta una interacción mayor al *hopping* ($U_f > g$), lo que facilita que L obtenga información de R y, en consecuencia, contribuya positivamente a su flujo de información, de modo que $\dot{I}_L > \dot{I}_R$. Para diferencias de potencial pequeñas ($eV/T \lesssim 1$),

ambos flujos de información son prácticamente idénticos ($\dot{I}_L \approx \dot{I}_R$).

Un aspecto relevante de esta dinámica es la posible presencia de efectos cuánticos. Para examinar este fenómeno, se representan dos cantidades: la norma- l_1 de coherencia \mathcal{C}_{l_1} , que permite cuantificar la coherencia cuántica en el subsistema LR , y la concurrencia, que sirve como medida del entrelazamiento entre estados del subsistema LR ($|1, 0\rangle, |0, 1\rangle$).

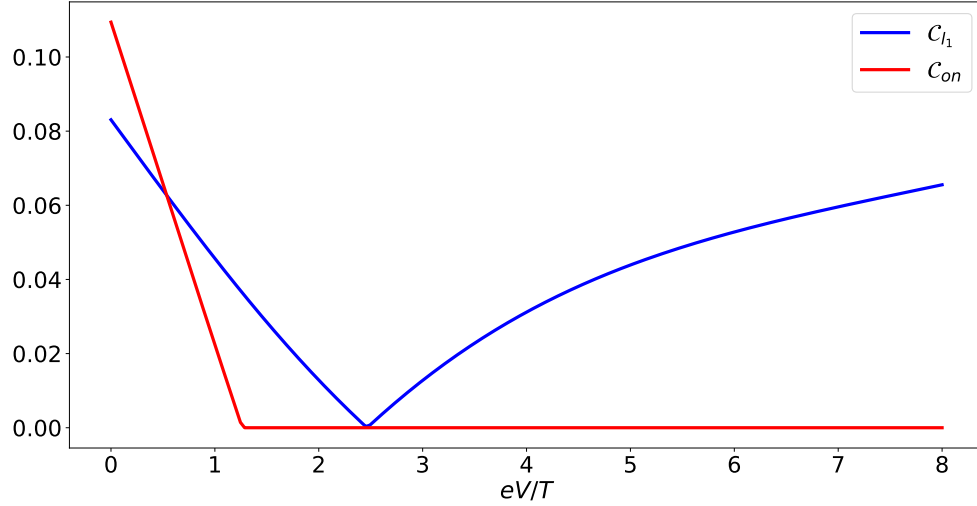


Figura 4.17: En línea azul la norma- l_1 de la coherencia \mathcal{C}_{l_1} y en línea rojas la concurrencia \mathcal{C}_{on} .

Se observan dos comportamientos relevantes. Primero, para $eV/T \lesssim 1$, la concurrencia $\mathcal{C}_{on} > 0$, lo que indica la presencia de entrelazamiento entre los sitios L y R . Segundo, al analizar la coherencia, se aprecia que para $eV/T \lesssim 2.4$ esta disminuye progresivamente hasta anularse, y luego comienza a incrementarse, a partir de $eV/T \gtrsim 2.4$. Este comportamiento es particularmente significativo, ya que la coherencia se anula en un punto cercano al valor en el que la corriente de partículas invierte su dirección.

Dado el comportamiento tipo Demonio de Maxwell del sistema, resulta pertinente examinar cómo las cantidades termodinámicas se ven influenciadas por la coherencia, el parámetro del Hamiltoniano \hat{H}_S que se encarga de inducir coherencia en el sistema, es el acoplamiento g . Por ende, en la Figura 4.18 se muestran las cantidades termodinámicas en función del parámetro g/κ_L .

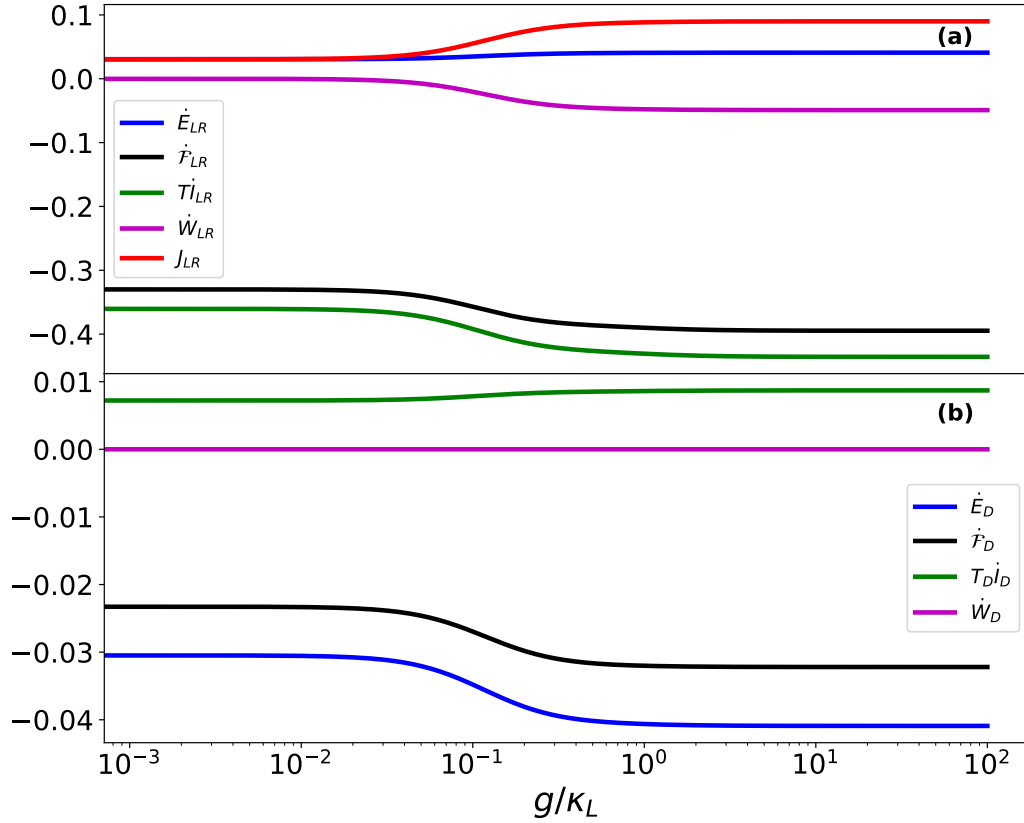


Figura 4.18: Cantidades termodinámicas para el sistema LR y el Demonio en función de g/κ_L , considerando $eV/T = 1$ y el resto de parámetros corresponden a los de la Figura 4.12.

Se observa que cuando el acoplamiento se encuentra en un régimen $g/\kappa_L \gtrsim 10^{-1}$, la potencia generada del subsistema LR (\dot{W}_{LR}) y la contribución informacional ($T\dot{I}_{LR}$) decrecen, por ende, el subsistema LR realiza más trabajo, y entrega más información al sitio D . Este resultado sugiere que un acoplamiento suficientemente fuerte entre los sitios L y R potencia la conversión de información en trabajo.

Además, bajo esta misma condición $g/\kappa_L \gtrsim 10^{-1}$, el flujo de energía del demonio \dot{E}_D se vuelve más negativo, lo que indica mayor transporte energético entre el demonio y el sistema LR .

Por otra parte, el análisis de las contribuciones individuales a los flujos de información revela cómo el acoplamiento modifica la cantidad de información entregada por cada punto cuántico. Estos efectos se visualizan en la Figura 4.19, donde se aprecia la dependencia de los flujos informacionales con respecto al parámetro g .

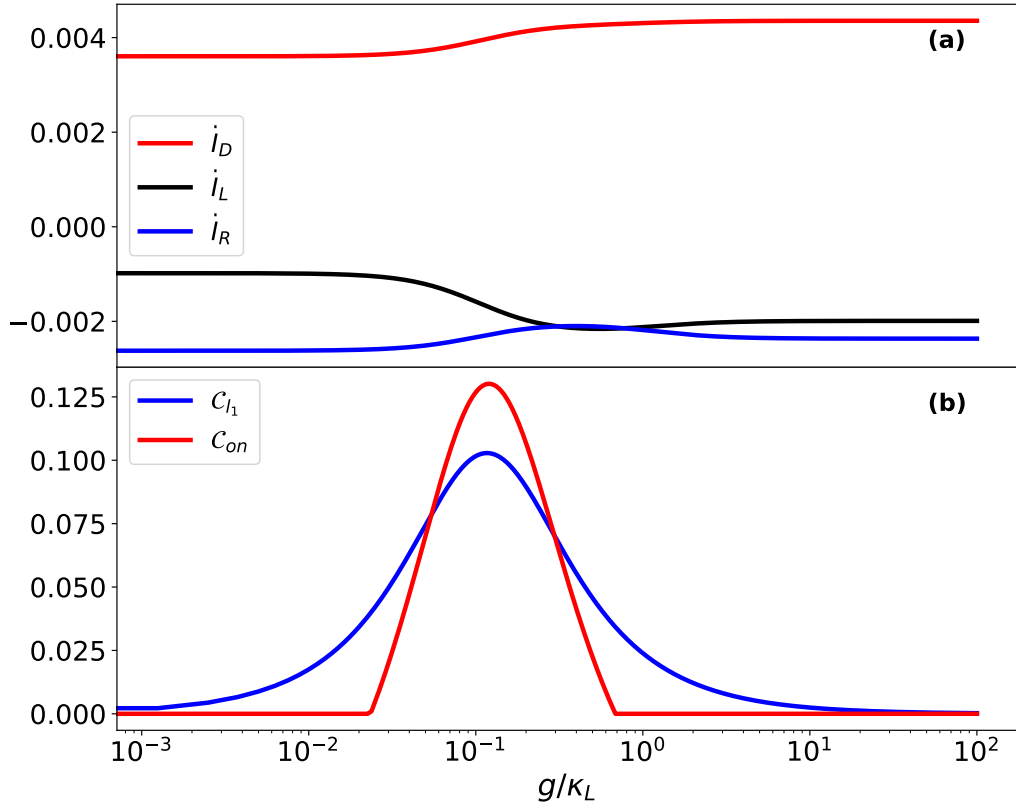


Figura 4.19: (a)Flujos de información de cada sitio. (b)Concurrencia y coherencia en función de g/κ_L .

Un comportamiento notable se presenta cuando el acoplamiento alcanza valores comparables a la tasa de túnel, es decir, $10^{-1} < g/\kappa_L < 10^0$. En este régimen, tanto la concurrence como la coherencia alcanzan valores cercanos a sus máximos, lo que indica una presencia significativa de efectos cuánticos entre los puntos L y R , resultado que se asemeja a [23].

Simultáneamente, los flujos de información individuales tienden a igualarse, es decir, $\dot{I}_L \approx \dot{I}_R$, lo que sugiere que, en condiciones de entrelazamiento y coherencia elevadas, ambos puntos cuánticos contribuyen de manera equilibrada en el flujo de información del sistema LR .

4.4.3. Comparación con caso clásico

Una de las ventajas del formalismo presentado en [22] es que permite incluir términos no seculares en la dinámica del sistema. Esto posibilita la aparición de coherencias y entrelazamiento no nulos en el régimen $g \sim \kappa_L$. La pregunta natural que surge es si estos efectos cuánticos representan una ventaja para el funcionamiento del demonio. Para abordar esta cuestión, se puede considerar una evolución semiclásica, limitada a las componentes diagonales de la matriz de densidad del sistema. Inicialmente se considera una evolución descrita por el superoperador

$$\check{\mathcal{L}}_f|\hat{\rho}\rangle\rangle = -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \mathcal{L}(\hat{\rho}),$$

que combina la dinámica coherente del sistema con la disipación inducida por los baños, como por ejemplo 2.11. Este superoperador puede descomponerse como $\check{\mathcal{L}}_f = \check{\mathcal{L}}_0 + \check{\mathcal{V}}$, donde el término $\check{\mathcal{V}}$ representa el acoplamiento entre los sitios y actúa como

$$\check{\mathcal{V}}|\hat{\rho}\rangle\rangle = -ig[\hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R + \hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L, \hat{\rho}].$$

Para obtener una ecuación maestra que describa únicamente la dinámica de las partes diagonales de la matriz densidad, se aplica el formalismo de Nakajima-Zwanzig [24], con los operadores $\check{\mathcal{P}}$ y $\check{\mathcal{Q}}$ que distinguen la parte relevante(diagonal) y la parte no relevante(no diagonal) de la matriz densidad $\hat{\rho}_S$, lo que conduce a la ecuación maestra

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}_S(t)\rangle\rangle = (\check{\mathcal{L}}_0 - \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0^+\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}})\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}_S(t)\rangle\rangle. \quad (4.3)$$

Con el operador inverso $\check{\mathcal{L}}_0^+$ que consiste en el inverso de Drazin del operador $\check{\mathcal{L}}_0$, dado por

$$\check{\mathcal{L}}_0^+ = - \int_0^\infty d\tau e^{\check{\mathcal{L}}_0\tau} \check{\mathcal{Q}},$$

según lo discutido en [32]. La demostración detallada de la ecuación 4.3 se encuentra en el Apéndice C.7.

El hecho de disponer de una ecuación maestra que describe únicamente la evolución de las partes diagonales de la matriz densidad, permite modelar el sistema de manera estocástica. Esto se logra mediante un vector de probabilidades de ocupación definido como:

$$\mathbf{P} = [\rho_{000}, \rho_{100}, \rho_{010}, \rho_{001}, \rho_{110}, \rho_{101}, \rho_{011}, \rho_{111}]^T,$$

cuya dinámica está gobernada por la ecuación maestra

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P} = \mathbf{W}\mathbf{P}, \quad (4.4)$$

donde la matriz de transición \mathbf{W} puede obtenerse a partir de la ecuación (4.3).

En lo que sigue, se estudiará el estado estacionario de la ecuación maestra presentada en la ecuación 4.4. En particular, se compararán las probabilidades de ocupación obtenidas en este modelo clásico con aquellas resultantes del tratamiento cuántico, lo cual se muestra en las Figuras 4.20 y 4.21.

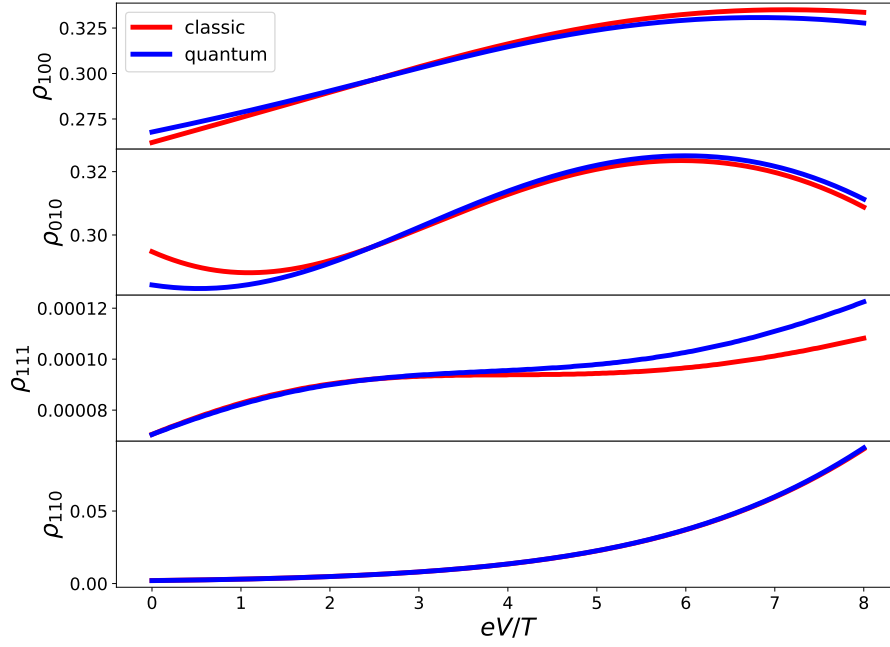


Figura 4.20: Elementos diagonales ρ_{100} , ρ_{010} , ρ_{111} y ρ_{110} en función de eV/T . Donde el caso clásico corresponde a la línea roja y el caso cuántico a la línea azul.

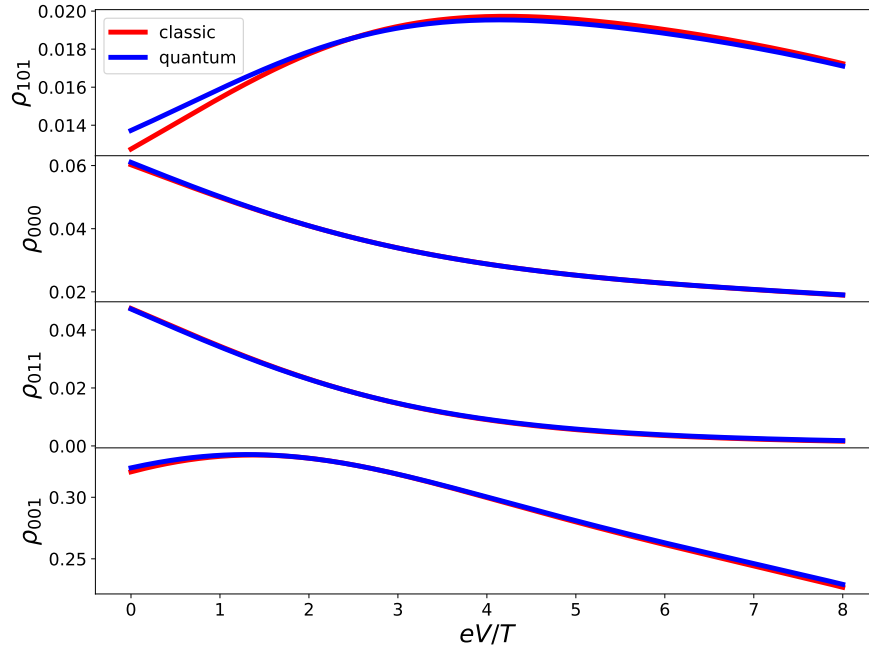


Figura 4.21: Elementos diagonales ρ_{101} , ρ_{000} , ρ_{011} y ρ_{001} en función de eV/T .

De las Figuras 4.20 y 4.21 se observa que en los dos casos, las probabilidades de ocupación dominantes corresponden a ρ_{100} , ρ_{010} y ρ_{001} . Por el contrario, la probabilidad de ocupación más pequeña es ρ_{111} .

Se puede notar que, cerca del punto $eV/T \approx 2.4$ donde la coherencia es casi nula, todas las

probabilidades de ocupación clásicas se cruzan con sus contrapartes cuánticas. En cambio, para $eV/T \lesssim 1$, los elementos ρ_{100} , ρ_{010} y ρ_{101} presentan una diferencia apreciable entre los comportamientos cuántico y clásico, lo cual se puede interpretar como un efecto de la coherencia sobre estos elementos.

A partir de la solución estacionaria del sistema, es posible calcular los flujos de corriente de partículas e información asociados al baño α mediante las expresiones

$$\dot{N}_\alpha = -\mathbf{N}^T \mathbf{W}_\alpha \mathbf{P}, \quad (4.5)$$

$$\dot{I}_\alpha = -(\log \mathbf{P})^T \mathbf{W}_\alpha \mathbf{P}, \quad (4.6)$$

donde \mathbf{P} es el vector de probabilidades en la base de Fock utilizada, \mathbf{W}_α es la contribución del baño α en la evolución \mathbf{W} , \mathbf{N} contiene el número de partículas en cada estado, y $\log \mathbf{P}$ se refiere al logaritmo aplicado componente a componente.

En el modelo clásico, la expresión analítica para el flujo de corriente de partículas correspondiente al baño L es idéntica al cuántico. Usando la expresión 4.5, la corriente de partículas esta dada por

$$\begin{aligned} \dot{N}_L = & \kappa_L \left(f_L(\epsilon) \rho_{000} - [1 - f_L(\epsilon)] \rho_{100} \right) \\ & + \kappa_L^U \left(f_L(\epsilon + U) \rho_{001} - [1 - f_L(\epsilon + U)] \rho_{101} \right) \\ & + \kappa_L \left(f_L(\epsilon + U_f) \rho_{010} - [1 - f_L(\epsilon + U_f)] \rho_{110} \right) \\ & + \kappa_L \left(f_L(\epsilon + U + U_f) \rho_{011} - [1 - f_L(\epsilon + U + U_f)] \rho_{111} \right). \end{aligned}$$

Por otro lado, mediante la expresión 4.6 se obtienen los flujos de información clásicos asociados a los baños L y R , los cuales están descritos por

$$\begin{aligned} \dot{I}_L = & \kappa_L (f_L(\epsilon) [\rho_{000} \ln \rho_{100} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_L(\epsilon)) [\rho_{100} \ln \rho_{000} - \rho_{100} \ln \rho_{100}]) \\ & + \kappa_L^U (f_L(\epsilon + U) [\rho_{001} \ln \rho_{101} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_L(\epsilon + U)) [\rho_{101} \ln \rho_{001} - \rho_{101} \ln \rho_{101}]) \\ & + \kappa_L (f_L(\epsilon + U_f) [\rho_{010} \ln \rho_{110} - \rho_{010} \ln \rho_{010}] + (1 - f_L(\epsilon + U_f)) [\rho_{110} \ln \rho_{010} - \rho_{110} \ln \rho_{110}]) \\ & + \kappa_L (f_L(\epsilon + U + U_f) [\rho_{011} \ln \rho_{111} - \rho_{011} \ln \rho_{011}]) \\ & + \kappa_L ((1 - f_L(\epsilon + U + U_f)) [\rho_{111} \ln \rho_{011} - \rho_{111} \ln \rho_{111}]) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{I}_R = & \kappa_R (f_R(\epsilon) [\rho_{000} \ln \rho_{010} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_R(\epsilon)) [\rho_{010} \ln \rho_{000} - \rho_{010} \ln \rho_{010}]) \\ & + \kappa_R^U (f_R(\epsilon + U) [\rho_{001} \ln \rho_{011} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_R(\epsilon + U)) [\rho_{011} \ln \rho_{001} - \rho_{011} \ln \rho_{011}]) \\ & + \kappa_R (f_R(\epsilon + U_f) [\rho_{100} \ln \rho_{110} - \rho_{100} \ln \rho_{100}] + (1 - f_R(\epsilon + U_f)) [\rho_{110} \ln \rho_{100} - \rho_{110} \ln \rho_{110}]) \\ & + \kappa_R (f_R(\epsilon + U + U_f) [\rho_{101} \ln \rho_{111} - \rho_{101} \ln \rho_{101}]) \\ & + \kappa_R ((1 - f_R(\epsilon + U + U_f)) [\rho_{111} \ln \rho_{101} - \rho_{111} \ln \rho_{111}]). \end{aligned}$$

La versión cuántica de los flujos de información se encuentra detallada en el apéndice C.9. En la Figura 4.22 se muestra una comparación gráfica entre los casos clásico y cuántico para estas cantidades.

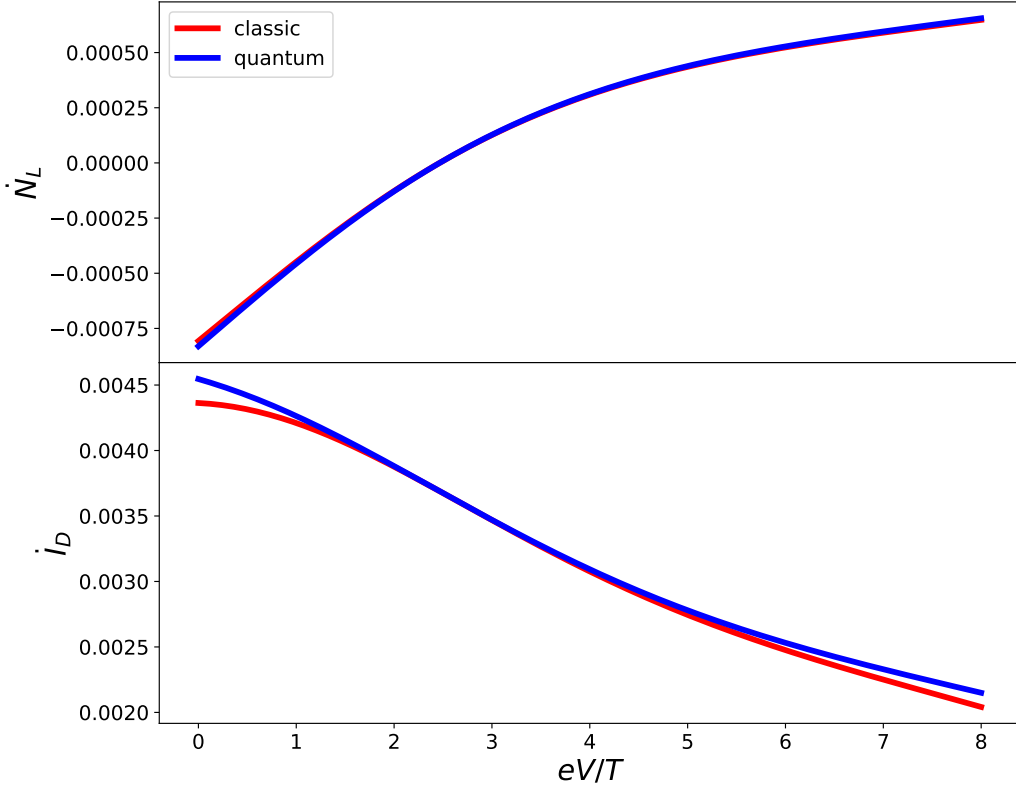


Figura 4.22: Corriente de partículas y flujos de información para el caso clásico(rojo) y cuántico(azul) en función de eV/T .

Como se muestra en la Figura 4.22, en el régimen $eV/T \lesssim 2.4$ la corriente de partículas calculada en el caso cuántico es menor a la del caso clásico, lo que representa una ventaja del caso cuántico, pues al ser menor la corriente, esto significa que hay mayor transporte de electrones en contra del gradiente de potencial. Por otro lado, para $eV/T \gtrsim 2.4$ la corriente de partículas en el caso cuántico es mayor que en el caso clásico.

Como se observa en la Figura 4.22, el flujo de información asociado al sitio D es mayor en el caso cuántico, mostrando una diferencia apreciable en las regiones $eV/T \lesssim 1$ y $eV/T \gtrsim 6$. Este resultado indica que la dinámica cuántica permite una mejora en el intercambio de información entre el sistema D y el subsistema LR . Dicha mejora se explica porque el sitio D no solo establece correlaciones clásicas a través de los elementos diagonales del estado, sino que, debido a la presencia de coherencia, también genera correlaciones cuánticas con el sistema LR , incluso cuando la interacción entre ellos es exclusivamente de tipo clásico, mediada por la energía de Coulomb. Este comportamiento se corrobora con los flujos de información cuánticos obtenidos analíticamente, los cuales presentan contribuciones provenientes de los elementos no diagonales de la matriz densidad (ver Apéndice C.9).

Finalmente, debido a este aumento en el flujo de información en el régimen cuántico, la tasa de cambio de la energía libre del subsistema LR , dada por $\dot{\mathcal{F}}_{LR} \approx T\dot{I}_{LR}$, disminuye. Como consecuencia, se incrementa la capacidad del sistema para realizar trabajo, lo cual evidencia el rol beneficioso de la coherencia cuántica como recurso termodinámico.

Conclusiones

En esta tesis se derivó una ecuación maestra en la base local para un sistema compuesto por tres puntos cuánticos, la cual permite incorporar y analizar términos no seculares en su evolución. Se observó que, dependiendo de las tasas de túnel asociadas a los reservorios L y R , existen ciertas regiones del parámetro eV/T en los cuales el sistema exhibe un comportamiento análogo al de un Demonio de Maxwell autónomo. En estas regiones, los flujos de información entre el punto cuántico D y el subsistema LR permiten la realización de trabajo, manifestado como un transporte neto de partículas en contra del gradiente de potencial. Este fenómeno implica una aparente violación de la segunda ley de la termodinámica, en concordancia con resultados previos obtenidos para sistemas de dos puntos cuánticos, donde también se identifica un comportamiento tipo Demonio de Maxwell [13].

Se obtuvo que los flujos de información asociados a los sitios L y R presentan una dependencia explícita en el parámetro de acoplamiento g . En particular, dichos flujos se igualan en torno a $g \sim \kappa_L$, lo que coincide con un régimen en el cual tanto la coherencia cuántica como la concurrencia alcanzan valores cercanos a su máximo. Este resultado evidencia que la coherencia y el entrelazamiento impactan directamente en la dinámica de los flujos de información.

Asimismo, se comparó la evolución cuántica completa del sistema con una descripción semiclásica que considera únicamente las partes diagonales de la matriz densidad. Se observó que, para valores de $eV/T \lesssim 2.4$, la corriente de partículas es menor en el caso cuántico. Además, los flujos de información que recibe el sitio D (el Demonio) resultan ser mayores en la descripción cuántica que en la semiclásica. Esta observación tiene dos implicancias relevantes. Primero, confirma que la coherencia cuántica puede actuar como un recurso termodinámico, pues al aumentar el flujo de información hacia el demonio, se incrementa la cota superior para el trabajo que el subsistema LR puede realizar. Segundo, muestra que incluso cuando la interacción entre el demonio y el sistema es puramente clásica (de tipo Coulomb), los efectos cuánticos —como la coherencia— continúan desempeñando un papel en la transferencia de información.

Finalmente, el modelo propuesto admite diversas extensiones. Una dirección posible consiste en derivar una ecuación maestra para el caso en que la interacción de Coulomb entre el sitio D y los sitios L y R sea asimétrica. Este tipo de asimetría podría inducir un comportamiento de tipo Demonio de Maxwell autónomo, análogo al que se ha reportado recientemente en modelos clásicos [55]. Por otro lado, desde el punto de vista del transporte, sería interesante incorporar más puntos cuánticos al sistema, lo que permitiría incluir más *hopping* en el modelo y encontrar efectos adicionales de coherencia cuántica, como se estudia en [56].

Bibliografia

- [1] Maxwell, J. C., Theory of Heat. 1871.
- [2] Szilard, L., “On the decrease of entropy in a thermodynamic system by the intervention of intelligent beings”, Behavioral Science, vol. 9, no. 4, pp. 301–310, 1964.
- [3] Brillouin, L., “Maxwell’s demon cannot operate: Information and entropy. i”, Journal of Applied Physics, vol. 22, no. 3, pp. 334–337, 1951.
- [4] Landauer, R., “Irreversibility and heat generation in the computing process”, IBM Journal of Research and Development, vol. 5, p. 183–191, Jul 1961, [doi:10.1147/rd.53.0183](https://doi.org/10.1147/rd.53.0183).
- [5] Bennett, C. H., “The thermodynamics of computation—a review”, International Journal of Theoretical Physics, vol. 21, no. 12, pp. 905–940, 1982.
- [6] Douarche, F., Ciliberto, S., Petrosyan, A., y Rabbiosi, I., “An experimental test of the jarzynski equality in a mechanical experiment”, Europhysics Letters, vol. 70, no. 5, p. 593, 2005.
- [7] Wang, G., Reid, J. C., Carberry, D., Williams, D., Sevick, E. M., y Evans, D. J., “Experimental study of the fluctuation theorem in a nonequilibrium steady state”, Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, vol. 71, no. 4, p. 046142, 2005.
- [8] Van den Broeck, C., “Stochastic thermodynamics: A brief introduction”, en Physics of Complex Colloids, pp. 155–193, IOS Press, 2013.
- [9] Jarzynski, C., “Nonequilibrium equality for free energy differences”, Physical Review Letters, vol. 78, no. 14, p. 2690, 1997.
- [10] Cao, F. J. y Feito, M., “Thermodynamics of feedback controlled systems”, Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, vol. 79, no. 4, p. 041118, 2009.
- [11] Sagawa, T. y Ueda, M., “Generalized jarzynski equality under nonequilibrium feedback control”, Physical review letters, vol. 104, no. 9, p. 090602, 2010.
- [12] Ehrich, J. y Sivak, D. A., “Energy and information flows in autonomous systems”, Frontiers in Physics, vol. 11, p. 1108357, 2023.
- [13] Horowitz, J. M. y Esposito, M., “Thermodynamics with continuous information flow”, Physical Review X, vol. 4, no. 3, p. 031015, 2014.
- [14] Ptaszyński, K. y Esposito, M., “Thermodynamics of quantum information flows”, Physical review letters, vol. 122, no. 15, p. 150603, 2019.
- [15] Gorini, V., Kossakowski, A., y Sudarshan, E. C. G., “Completely positive dynamical semigroups of n-level systems”, Journal of Mathematical Physics, vol. 17, no. 5, pp. 821–

825, 1976.

- [16] Lindblad, G., “On the generators of quantum dynamical semigroups”, *Communications in mathematical physics*, vol. 48, no. 2, pp. 119–130, 1976.
- [17] Breuer, H.-P. y Petruccione, F., *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press, USA, 2002.
- [18] Ptaszyński, K. y Esposito, M., “Fermionic one-body entanglement as a thermodynamic resource”, *Physical Review Letters*, vol. 130, no. 15, p. 150201, 2023.
- [19] Streltsov, A., Adesso, G., y Plenio, M. B., “Colloquium: Quantum coherence as a resource”, *Reviews of Modern Physics*, vol. 89, no. 4, p. 041003, 2017.
- [20] Levy, A. y Kosloff, R., “The local approach to quantum transport may violate the second law of thermodynamics”, *Europhysics Letters*, vol. 107, no. 2, p. 20004, 2014.
- [21] Novotný, T., “Investigation of apparent violation of the second law of thermodynamics in quantum transport studies”, *Europhysics Letters*, vol. 59, no. 5, p. 648, 2002.
- [22] Potts, P. P., Kalaei, A. A. S., y Wacker, A., “A thermodynamically consistent markovian master equation beyond the secular approximation”, *New Journal of Physics*, vol. 23, no. 12, p. 123013, 2021.
- [23] Prech, K., Johansson, P., Nyholm, E., Landi, G. T., Verdozzi, C., Samuelsson, P., y Potts, P. P., “Entanglement and thermokinetic uncertainty relations in coherent mesoscopic transport”, *Physical Review Research*, vol. 5, no. 2, p. 023155, 2023.
- [24] Zwanzig, R. W., “Statistical mechanics of irreversibility”, *Quantum Statistical Mechanics*, p. 139, 1966.
- [25] Friis, N., Lee, A. R., y Bruschi, D. E., “Fermionic-mode entanglement in quantum information”, *Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics*, vol. 87, no. 2, p. 022338, 2013.
- [26] Vidal, N. T., Bera, M. L., Riera, A., Lewenstein, M., y Bera, M. N., “Quantum operations in an information theory for fermions”, *Physical Review A*, vol. 104, no. 3, p. 032411, 2021.
- [27] Manzano, D., “A short introduction to the lindblad master equation”, *Aip advances*, vol. 10, no. 2, 2020.
- [28] Esposito, M., Lindenberg, K., y Van den Broeck, C., “Entropy production as correlation between system and reservoir”, *New Journal of Physics*, vol. 12, no. 1, p. 013013, 2010.
- [29] Geva, E., Rosenman, E., y Tannor, D., “On the second-order corrections to the quantum canonical equilibrium density matrix”, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 113, no. 4, pp. 1380–1390, 2000.
- [30] Strasberg, P. y Esposito, M., “Non-markovianity and negative entropy production rates”, *Physical Review E*, vol. 99, no. 1, p. 012120, 2019.
- [31] Esposito, M., Harbola, U., y Mukamel, S., “Nonequilibrium fluctuations, fluctuation theorems, and counting statistics in quantum systems”, *Reviews of modern physics*, vol. 81, no. 4, pp. 1665–1702, 2009.
- [32] Landi, G. T., Kewming, M. J., Mitchison, M. T., y Potts, P. P., “Current fluctuations in open quantum systems: Bridging the gap between quantum continuous measurements

- and full counting statistics”, PRX Quantum, vol. 5, no. 2, p. 020201, 2024.
- [33] Folland, G. B. y Sitaram, A., “The uncertainty principle: a mathematical survey”, Journal of Fourier analysis and applications, vol. 3, pp. 207–238, 1997.
 - [34] Trushechkin, A., “Unified gorini-kossakowski-lindblad-sudarshan quantum master equation beyond the secular approximation”, Physical Review A, vol. 103, no. 6, p. 062226, 2021.
 - [35] Chruściński, D. y Pascazio, S., “A brief history of the gkls equation”, Open Systems & Information Dynamics, vol. 24, no. 03, p. 1740001, 2017.
 - [36] Wichterich, H., Henrich, M. J., Breuer, H.-P., Gemmer, J., y Michel, M., “Modeling heat transport through completely positive maps”, Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, vol. 76, no. 3, p. 031115, 2007.
 - [37] Spohn, H. y Lebowitz, J. L., “Irreversible thermodynamics for quantum systems weakly coupled to thermal reservoirs”, Adv. Chem. Phys, vol. 38, pp. 109–142, 2007.
 - [38] Parrondo, J. M., Tabanera-Bravo, J., Fedele, F., y Ares, N., “Information flows in nanomachines”, en European ESiM Workshop «Crossroad of Maxwell Demon», pp. 1–31, Springer, 2023.
 - [39] Koski, J. V., Kutvonen, A., Khaymovich, I. M., Ala-Nissila, T., y Pekola, J. P., “On-chip maxwell’s demon as an information-powered refrigerator”, Physical review letters, vol. 115, no. 26, p. 260602, 2015.
 - [40] Maruyama, K., Nori, F., y Vedral, V., “Colloquium: The physics of maxwell’s demon and information”, Reviews of Modern Physics, vol. 81, no. 1, pp. 1–23, 2009.
 - [41] Sagawa, T. y Ueda, M., “Second law of thermodynamics with discrete quantum feedback control”, Physical review letters, vol. 100, no. 8, p. 080403, 2008.
 - [42] Htkym, “Maxwell’s demon”, 2007, <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.
 - [43] Lan, G., Sartori, P., Neumann, S., Sourjik, V., y Tu, Y., “The energy–speed–accuracy trade-off in sensory adaptation”, Nature physics, vol. 8, no. 5, pp. 422–428, 2012.
 - [44] Van den Broeck, C. y Esposito, M., “Ensemble and trajectory thermodynamics: A brief introduction”, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, vol. 418, pp. 6–16, 2015.
 - [45] Van Kampen, N., Stochastic Processes in Physics and Chemistry. North-Holland Publishing Co, 1992.
 - [46] Parrondo, J. M., Horowitz, J. M., y Sagawa, T., “Thermodynamics of information”, Nature physics, vol. 11, no. 2, pp. 131–139, 2015.
 - [47] Cover, T. M., Elements of information theory. John Wiley & Sons, 1999.
 - [48] Spohn, H., “Entropy production for quantum dynamical semigroups”, Journal of Mathematical Physics, vol. 19, no. 5, pp. 1227–1230, 1978.
 - [49] Hanson, R., Kouwenhoven, L. P., Petta, J. R., Tarucha, S., y Vandersypen, L. M., “Spins in few-electron quantum dots”, Reviews of modern physics, vol. 79, no. 4, pp. 1217–1265, 2007.
 - [50] Kouwenhoven, L. P., Austing, D., y Tarucha, S., “Few-electron quantum dots”, Reports on progress in physics, vol. 64, no. 6, p. 701, 2001.

- [51] Ashoori, R., “Electrons in artificial atoms”, *Nature*, vol. 379, no. 6564, pp. 413–419, 1996.
- [52] Simon, S. H., *The Oxford solid state basics*. OUP Oxford, 2013.
- [53] Hill, S. A. y Wootters, W. K., “Entanglement of a pair of quantum bits”, *Physical review letters*, vol. 78, no. 26, p. 5022, 1997.
- [54] Wootters, W. K., “Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits”, *Physical Review Letters*, vol. 80, no. 10, p. 2245, 1998.
- [55] Monsel, J., Acciai, M., Sánchez, R., y Splettstoesser, J., “Autonomous demon exploiting heat and information at the trajectory level”, *Physical Review B*, vol. 111, no. 4, p. 045419, 2025.
- [56] Khandelwal, S., Annby-Andersson, B., Diotallevi, G. F., Wacker, A., y Tavakoli, A., “Maximal steady-state entanglement in autonomous quantum thermal machines”, *npj Quantum Information*, vol. 11, no. 1, p. 28, 2025.
- [57] Hu, J., Luo, M., Jiang, F., Xu, R.-X., y Yan, Y., “Padé spectrum decompositions of quantum distribution functions and optimal hierarchical equations of motion construction for quantum open systems”, *The Journal of chemical physics*, vol. 134, no. 24, 2011.
- [58] Schinabeck, C., “Hierarchical quantum master equation approaches to nonequilibrium charge transport through single-molecule junctions”, 2019.
- [59] Riley, K. F., Hobson, M. P., y Bence, S. J., *Mathematical methods for physics and engineering: a comprehensive guide*. Cambridge university press, 2006.
- [60] Bartlett, S. D., Rudolph, T., y Spekkens, R. W., “Reference frames, superselection rules, and quantum information”, *Reviews of Modern Physics*, vol. 79, no. 2, pp. 555–609, 2007.
- [61] Wick, G. C., Wightman, A. S., y Wigner, E. P., “The intrinsic parity of elementary particles”, Part I: Particles and Fields. Part II: Foundations of Quantum Mechanics, pp. 102–106, 1997.

Anexos

Anexo A. Cálculos realizados sección 2

A.1. Matriz de densidad en función del campo de conteo

Al sustituir la distribución de probabilidad en la función generadora 2.1, se obtiene la expresión

$$\begin{aligned}
\Lambda(\vec{\lambda}, \vec{\chi}) &= \sum_{\mathbf{E}, \mathbf{E}', \mathbf{N}, \mathbf{N}'} \int d\mathbf{Q} d\mathbf{W} P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N}) P_0(\mathbf{E}, \mathbf{N}) \\
&\times \Pi_\alpha \delta(W_\alpha - \mu_\alpha(N_\alpha - N'_\alpha)) \delta(Q_\alpha + W_\alpha - (E_\alpha - E'_\alpha)) e^{-i\vec{\lambda} \cdot \mathbf{Q}} e^{-i\vec{\chi} \cdot \mathbf{W}} \\
&= \sum_{\mathbf{E}, \mathbf{E}', \mathbf{N}, \mathbf{N}'} P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N}) P_0(\mathbf{E}, \mathbf{N}) \Pi_\alpha e^{-i\chi_\alpha \mu_\alpha (N_\alpha - N'_\alpha)} e^{-i\lambda_\alpha ((E_\alpha - \mu_\alpha N_\alpha) - (E'_\alpha - \mu_\alpha N'_\alpha))} \\
&= \sum_{\mathbf{E}, \mathbf{E}', \mathbf{N}, \mathbf{N}'} \text{Tr}\{\hat{P}_{\mathbf{E}', \mathbf{N}'} \hat{U}(t) \hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}} (\hat{\rho}_S(0) \otimes \Pi_\alpha \hat{\tau}_\alpha) \hat{P}_{\mathbf{E}, \mathbf{N}} \hat{U}^\dagger(t) \hat{P}_{\mathbf{E}', \mathbf{N}'}\} \\
&\times \Pi_\alpha e^{-i\chi_\alpha \mu_\alpha (N_\alpha - N'_\alpha)} e^{-i\lambda_\alpha ((E_\alpha - \mu_\alpha N_\alpha) - (E'_\alpha - \mu_\alpha N'_\alpha))}.
\end{aligned}$$

Si se considera un observable $\hat{A}(0)$ con una descomposición espectral asociada a los proyectores \hat{P}_{a_0} , y se aplican estos proyectores sobre un estado diagonal $\hat{\rho}_{\text{diag}}$, se obtiene la identidad[31]

$$\sum_{a_0} e^{-i\lambda a_0} \hat{P}_{a_0} \hat{\rho}_{\text{diag}} \hat{P}_{a_0} = e^{-i(\lambda/2)\hat{A}(0)} \hat{\rho}_{\text{diag}} e^{-i(\lambda/2)\hat{A}(0)}. \quad (\text{A.1})$$

Esta relación permite reescribir la función generadora en términos de un observable $\hat{A}(0)$ y el estado inicial diagonal. Así, se puede utilizar A.1 con el observable $\hat{A}(0) = \sum_\alpha [\lambda_\alpha (\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha) + \chi_\alpha \mu_\alpha \hat{N}_\alpha]$ y se obtiene

$$\begin{aligned}
\Lambda(\vec{\lambda}, \vec{\chi}) &= \sum_{\mathbf{E}', \mathbf{N}'} \text{Tr}\{\hat{P}_{\mathbf{E}', \mathbf{N}'} \hat{U}(t) e^{-\frac{i}{2} \sum_\alpha [\lambda_\alpha (\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha) + \chi_\alpha \mu_\alpha \hat{N}_\alpha]} \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) e^{-\frac{i}{2} \sum_\alpha [\lambda_\alpha (\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha) + \chi_\alpha \mu_\alpha \hat{N}_\alpha]} \hat{U}^\dagger(t) \hat{P}_{\mathbf{E}', \mathbf{N}'}\} \\
&\times \Pi_\alpha e^{i\chi_\alpha \mu_\alpha \hat{N}_\alpha} e^{i\lambda_\alpha (\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)}\} \\
&= \text{Tr}\{\hat{U}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t) \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \hat{U}^\dagger(-\vec{\lambda}, -\vec{\chi}; t)\}.
\end{aligned}$$

A.2. Matriz de densidad generalizada

La ecuación 2.5 puede expandirse en serie hasta segundo orden, con el objetivo de obtener una expresión aproximada para la evolución de la matriz de densidad generalizada

$$|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle = \left(\mathbf{1} + \epsilon \int_0^t \check{\mathcal{L}}'_\lambda(t_1) dt_1 + \epsilon^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} \check{\mathcal{L}}'_\lambda(t_1) \check{\mathcal{L}}'_\lambda(t_2) dt_2 \right) |\hat{\rho}_{tot}(0)\rangle\rangle,$$

Al introducir el cambio de variables $t_1 = T$, $t_2 = T - s$, se transforma la integral doble en una forma más conveniente para su evaluación

$$\begin{aligned} |\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle &= \left(\mathbf{1} + \epsilon \int_0^t \check{\mathcal{L}}'_\lambda(T) dT + \epsilon^2 \int_0^t dT \int_0^T ds \check{\mathcal{L}}'_\lambda(T) \check{\mathcal{L}}'_\lambda(T - s) \right) |\hat{\rho}_{tot}(0)\rangle\rangle \\ &= \check{\mathcal{W}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) |\hat{\rho}_{tot}(0)\rangle\rangle \\ &= [\check{\mathcal{W}}_0(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) + \epsilon \check{\mathcal{W}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) + \epsilon^2 \check{\mathcal{W}}_2(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)] |\hat{\rho}_{tot}(0)\rangle\rangle, \end{aligned}$$

con los superoperadores definidos por

$$\begin{aligned} \check{\mathcal{W}}_0(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) &= \mathbf{1} \\ \check{\mathcal{W}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) &= \int_0^t dT \check{\mathcal{L}}'_\lambda(T) \\ \check{\mathcal{W}}_2(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) &= \int_0^t dT \int_0^T ds \check{\mathcal{L}}'_\lambda(T) \check{\mathcal{L}}'_\lambda(T - s). \end{aligned}$$

Considerando la expansión hasta segundo orden de la inversa del superoperador $\check{\mathcal{W}}$

$$\check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = \check{\mathcal{W}}_0(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) - \epsilon \check{\mathcal{W}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) + \epsilon^2 [\check{\mathcal{W}}_1^2(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) - \check{\mathcal{W}}_2(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)], \quad (\text{A.2})$$

se cumple la propiedad

$$\dot{\check{\mathcal{W}}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \check{\mathcal{A}} \check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = \epsilon \dot{\check{\mathcal{W}}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \check{\mathcal{A}} + \epsilon^2 [\dot{\check{\mathcal{W}}}_2(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \check{\mathcal{A}} - \dot{\check{\mathcal{W}}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \check{\mathcal{A}} \check{\mathcal{W}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)]. \quad (\text{A.3})$$

La obtención de la matriz densidad generalizada requiere proyectar la matriz de densidad total sobre el subespacio del sistema, lo que equivale a trazar los grados de libertad del reservorio. Para ello, se introduce el siguiente superoperador de proyección

$$\check{\mathcal{P}} = \sum_r |\rho_R^{eq}\rangle\rangle \langle\langle rr|,$$

donde $\otimes_\alpha \hat{\tau}_\alpha \rightarrow |\rho_R^{eq}\rangle\rangle$ representa el estado de equilibrio del reservorio, expresado como un vector en el espacio de Liouville. Al aplicar este proyector sobre la matriz densidad total, se obtiene

$$\check{\mathcal{P}} |\hat{\rho}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle = |\hat{\rho}_S(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \otimes |\rho_R^{eq}\rangle\rangle.$$

La evolución de la matriz densidad generalizada, siguiendo el formalismo de Nakajima–

Zwanzig, se expresa como

$$\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{W}}(t)(\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}})|\hat{\rho}_{tot}(0)\rangle\rangle \quad (\text{A.4})$$

$$\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{W}}(t)(\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}})|\hat{\rho}_{tot}(0)\rangle\rangle. \quad (\text{A.5})$$

Existen dos consideraciones fundamentales para continuar con el desarrollo. Primero, como se asume que la condición inicial del reservorio es diagonal, se cumple que

$$\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}_{tot}(0)\rangle\rangle = 0.$$

Segundo, se tiene que el estado total inicial puede expresarse como

$$|\hat{\rho}_{tot}(0)\rangle\rangle = \check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)|\hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle,$$

lo cual permite reformular la evolución proyectada en función del estado actual. Es decir,

$$\begin{aligned} |\hat{\rho}_{totI}(0)\rangle\rangle &= (\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}})\check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)(\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}})|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \\ &= \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)(\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}})|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle. \end{aligned}$$

Al tomar la derivada respecto al tiempo de las ecuaciones A.4 y A.5, se obtiene la siguiente expresión para la evolución proyectada

$$\begin{aligned} \check{\mathcal{P}}|\dot{\hat{\rho}}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle &= \check{\mathcal{P}}\dot{\check{\mathcal{W}}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \\ &= \check{\mathcal{P}}\dot{\check{\mathcal{W}}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \check{\mathcal{Q}}|\dot{\hat{\rho}}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle &= \check{\mathcal{Q}}\dot{\check{\mathcal{W}}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \\ &= \check{\mathcal{Q}}\dot{\check{\mathcal{W}}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle, \end{aligned}$$

cabe destacar que las ecuaciones obtenidas son exactas.

Para incorporar la hipótesis de acoplamiento débil entre el sistema y el reservorio, se comenzará utilizando la relación A.3, con lo cual se obtiene

$$\begin{aligned} \check{\mathcal{P}}\dot{\check{\mathcal{W}}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{W}}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{Q}} &= \epsilon\check{\mathcal{P}}\dot{\check{\mathcal{W}}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{Q}} \\ &\quad + \epsilon^2\check{\mathcal{P}}\dot{\check{\mathcal{W}}}_2(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{Q}} \\ &\quad - \epsilon^2\check{\mathcal{P}}\dot{\check{\mathcal{W}}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{W}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{Q}}, \end{aligned}$$

tanto el primer como el segundo término se anulan, debido a que $\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{Q}} = 0$. Por otro lado,

$$\check{\mathcal{P}}\dot{\check{\mathcal{W}}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}} = \sum_{r,r'} |\hat{\rho}_R^{eq}\rangle\rangle \langle\langle rr|\check{\mathcal{L}}'_\lambda(t)|\hat{\rho}_R^{eq}\rangle\rangle \langle\langle r'r'|,$$

donde el término $\langle\langle rr|\check{\mathcal{L}}'_\lambda(t)|\hat{\rho}_R^{eq}\rangle\rangle$ equivale a

$$\langle\langle rr|\check{\mathcal{L}}'_\lambda(t)|\hat{\rho}_R^{eq}\rangle\rangle = \text{Tr}_B\{\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_\lambda(t)\} - \text{Tr}_B\{\hat{V}_{-\lambda}(t)\hat{\rho}_R^{eq}\}. \quad (\text{A.6})$$

Dado que $\hat{\rho}_R^{eq}$ conmuta con \hat{H}_R , el estado de equilibrio también conmuta con $\hat{A}(\lambda, \chi)$. Por lo tanto, el término correspondiente a la ecuación A.6 se anula, quedando únicamente el siguiente término

$$\begin{aligned} \check{\mathcal{P}}\check{\dot{W}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{W}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}} &= \epsilon\check{\mathcal{P}}\check{\dot{W}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}} \\ &+ \epsilon^2\check{\mathcal{P}}\check{\dot{W}}_2(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}} \\ &- \epsilon^2\check{\mathcal{P}}\check{\dot{W}}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{W}_1(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}. \end{aligned}$$

De forma explícita, esto corresponde a

$$\check{\mathcal{P}}\check{\dot{W}}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}}\check{W}^{-1}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\check{\mathcal{P}} = \epsilon^2\check{\mathcal{P}} \int_0^t ds \check{\mathcal{L}}'_\lambda(t)\check{\mathcal{L}}'_\lambda(t-s)\check{\mathcal{P}}.$$

Si se utiliza la relación $\check{\mathcal{P}}|\dot{\hat{\rho}}_{\text{tot},I}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle = |\dot{\hat{\rho}}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \otimes |\hat{\rho}_R^{eq}\rangle\rangle$ y se aplica por la izquierda el operador $\sum_r \langle\langle rr|$, con el objetivo de eliminar los grados de libertad del reservorio, se obtiene

$$\dot{\hat{\rho}}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = \epsilon^2 \sum_r \langle\langle rr| \int_0^t ds \check{\mathcal{L}}'_\lambda(t)\check{\mathcal{L}}'_\lambda(t-s)|\hat{\rho}_R^{eq}\rangle\rangle \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t),$$

a partir de esta expresión, es posible derivar las funciones de correlación mediante el cálculo del producto dado por:

$$\sum_r \langle\langle rr|\check{\mathcal{L}}'_\lambda(t)\check{\mathcal{L}}'_\lambda(t-s)|\hat{\rho}_R^{eq}\rangle\rangle \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = \text{Tr}_B\{\mathcal{L}'_\lambda(t)\mathcal{L}'_\lambda(t-s)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\},$$

desarrollando de manera explícita, los términos de la ecuación

$$\mathcal{L}'_\lambda(t-s)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq} = -i[\hat{V}_\lambda(t-s)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq} - \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_{-\lambda}(t-s)],$$

así, se obtiene

$$\begin{aligned} \mathcal{L}'_\lambda(t)\mathcal{L}'_\lambda(t-s)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq} &= -\hat{V}_\lambda(t)\hat{V}_\lambda(t-s)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq} + \hat{V}_\lambda(t)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_{-\lambda}(t-s) \\ &+ \hat{V}_\lambda(t-s)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_{-\lambda}(t) - \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_{-\lambda}(t-s)\hat{V}_{-\lambda}(t). \end{aligned}$$

Finalmente, al aplicar la traza parcial sobre los grados de libertad del reservorio en esta ecuación, se obtiene la ecuación 2.6.

A.3. Funciones correlación

Para derivar la ecuación maestra generalizada en términos de las funciones de correlación, se partirá de la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B\{\hat{V}_\lambda(t)\hat{V}_\lambda(t-s)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\} = \\ - \sum_{\alpha, k, k'; j, j'} e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} e^{i\omega_{j'}s} \hat{S}_{\alpha k; j}^\dagger \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \text{Tr}_B\{e^{-(i/2)\hat{A}(\lambda, \chi)} \hat{B}_{\alpha, k}^\dagger(t) \hat{B}_{\alpha, k'}(t-s) e^{(i/2)\hat{A}(\lambda, \chi)} \hat{\rho}_R^{eq}\}, \end{aligned}$$

bajo homogeneidad temporal $\langle \hat{V}_\lambda(t)\hat{V}_\lambda(t-s) \rangle = \langle \hat{V}_\lambda(s)\hat{V}_\lambda(0) \rangle$, la ecuación se reduce a

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B\{\hat{V}_\lambda(t)\hat{V}_\lambda(t-s)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\} = \\ - \sum_{\alpha, k, k'; j, j'} e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} e^{i\omega_{j'}s} \hat{S}_{\alpha k; j}^\dagger \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \text{Tr}_B\{\hat{B}_{\alpha, k}^\dagger(s) \hat{B}_{\alpha, k'} \hat{\tau}_\alpha\} \\ \text{Tr}_B\{\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \hat{V}_{-\lambda}(t-s) \hat{V}_{-\lambda}(t)\} = \\ - \sum_{\alpha, k, k'; j, j'} e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} e^{-i\omega_j s} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha k; j}^\dagger \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \text{Tr}_B\{\hat{B}_{\alpha, k}^\dagger(s) \hat{B}_{\alpha, k'} \hat{\tau}_\alpha\}. \end{aligned}$$

Para analizar el término

$$\text{Tr}_B\{\hat{V}_\lambda(t)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_{-\lambda}(t-s)\},$$

se emplea la relación de conmutación (conservación global de partículas)

$$[\hat{B}_{\alpha, k}, \hat{N}_\alpha] = n_{\alpha, k} \hat{B}_{\alpha, k},$$

que implica

$$e^{C\hat{N}_\alpha} \hat{B}_{\alpha, k} e^{-C\hat{N}_\alpha} = e^{-Cn_{\alpha, k}} \hat{B}_{\alpha, k}, \quad (\text{A.7})$$

con C alguna constante. Se podrá utilizar la relación A.7 para obtener

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B\{\hat{V}_\lambda(t)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_{-\lambda}(t-s)\} \\ = \sum_{\alpha, k, k'; j, j'} e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} e^{-i\omega_j s} \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha k; j}^\dagger \text{Tr}_B\{e^{-i\hat{A}(\lambda, \chi)} \hat{B}_{\alpha, k}(t) e^{i\hat{A}(\lambda, \chi)} \hat{\rho}_R^{eq} \hat{B}_{\alpha, k'}^\dagger(t-s)\}. \end{aligned}$$

Por otro lado, para los operadores del baño se cumple

$$e^{-i\hat{A}(\lambda, \chi)} \hat{B}_{\alpha, k}(t) e^{i\hat{A}(\lambda, \chi)} = e^{-i\mu_\alpha n_{\alpha, k}(\lambda_\alpha - \chi_\alpha)} \hat{B}_{\alpha, k}(t + \lambda_\alpha), \quad (\text{A.8})$$

utilizando A.8, se obtiene

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B\{\hat{V}_\lambda(t)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_{-\lambda}(t-s)\} = \\ \sum_{\alpha, k, k'; j, j'} e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} e^{-i\omega_j s} \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha k; j}^\dagger C_{k, k'}^\alpha(-s - \lambda_\alpha) e^{-i\mu_\alpha n_{\alpha, k}(\lambda_\alpha - \chi_\alpha)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B\{\hat{V}_\lambda(t-s)\hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\hat{\rho}_R^{eq}\hat{V}_{-\lambda}(t)\} = \\ \sum_{\alpha, k, k'; j, j'} e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} e^{i\omega_{j'}s} \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha, k; j}^\dagger C_{k, k'}^\alpha(s - \lambda_\alpha) e^{-i\mu_\alpha n_{\alpha, k}(\lambda_\alpha - \chi_\alpha)}. \end{aligned}$$

Finalmente, al sustituir las expresiones desarrolladas para los términos de correlación en la ecuación 2.8, se obtiene la ecuación maestra generalizada para el sistema.

A.4. Ecuación de Lindblad generalizada

Se puede desarrollar la ecuación 2.7 para escribir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = & - \sum_{\alpha, k, k'; q} \int_0^\infty ds \left[e^{i\omega_q s} C_{k, k'}^\alpha(s) \left(\sum_j e^{i\omega_j t} \hat{S}_{\alpha, k; j}^\dagger \right) \left(\sum_{j'} e^{-i\omega_{j'} t} \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \right) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \right. \\ & + e^{-i\omega_q s} C_{k, k'}^\alpha(-s) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \left(\sum_j e^{i\omega_j t} \hat{S}_{\alpha, k; j}^\dagger \right) \left(\sum_{j'} e^{-i\omega_{j'} t} \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \right) \\ & - e^{-i\mu_\alpha n_{\alpha, k}(\lambda_\alpha - \chi_\alpha)} (e^{i\omega_q s} C_{k, k'}^\alpha(s - \lambda_\alpha) + e^{-i\omega_q s} C_{k, k'}^\alpha(-s - \lambda_\alpha)) \\ & \left. \times \left(\sum_{j'} e^{-i\omega_{j'} t} \hat{S}_{\alpha, k'; j'} \right) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \left(\sum_j e^{i\omega_j t} \hat{S}_{\alpha, k; j}^\dagger \right) \right], \end{aligned}$$

por simplicidad se asumirá que $C_{k, k'}^\alpha \propto \delta_{k, k'}$ (para fermiones y bosones los términos del tipo $\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_j \rangle$ suelen ser cero en el baño)[22]. Así, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = & - \sum_{\alpha, k; q} \int_0^\infty ds \left[e^{i\omega_q s} C_{k, k}^\alpha(s) \hat{S}_{\alpha, k; q}^\dagger(t) \hat{S}_{\alpha, k; q}(t) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) + e^{-i\omega_q s} C_{k, k}^\alpha(-s) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha, k; q}^\dagger(t) \hat{S}_{\alpha, k; q}(t) \right. \\ & \left. - e^{-i\mu_\alpha n_{\alpha, k}(\lambda_\alpha - \chi_\alpha)} (e^{i\omega_q s} C_{k, k}^\alpha(s - \lambda_\alpha) + e^{-i\omega_q s} C_{k, k}^\alpha(-s - \lambda_\alpha)) \hat{S}_{\alpha, k; q}(t) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha, k; q}^\dagger(t) \right]. \end{aligned}$$

Si se usan las identidades

$$\begin{aligned} \int_0^\infty ds e^{i\omega_q s} C_{k, k}^\alpha(s) &= \int_{-\infty}^\infty ds e^{i\omega_q s} (1 + \text{sgn}(s)) C_{k, k}^\alpha(s) / 2 \\ &= \int_{-\infty}^\infty ds e^{i\omega_q s} C_{k, k}^\alpha(s) / 2 + i \left(-\frac{i}{2} \right) \int_{-\infty}^\infty ds e^{i\omega_q s} \text{sgn}(s) C_{k, k}^\alpha(s) \\ &= \frac{1}{2} \gamma_k^\alpha(\omega_q) + i S_k^\alpha(\omega_q), \end{aligned}$$

y

$$\int_0^\infty ds e^{i\omega_q s} C_{k, k}^\alpha(s - \lambda_\alpha) = e^{i\lambda_\alpha \omega_q} \int_0^\infty ds e^{i(s - \lambda_\alpha) \omega_q} C_{k, k}^\alpha(s - \lambda_\alpha),$$

en la ecuación maestra. Finalmente queda la ecuación

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = & -i \sum_{\alpha, k; q} S_k^\alpha(\omega_q) \left[\hat{S}_{\alpha, k; q}^\dagger(t) \hat{S}_{\alpha, k; q}(t) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) - \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha, k; q}^\dagger(t) \hat{S}_{\alpha, k; q}(t) \right] \\ & + \sum_{\alpha, k; q} \gamma_k^\alpha(\omega_q) \left[e^{i\lambda_\alpha \omega_q + i(\chi_\alpha - \lambda_\alpha) \mu_\alpha n_{\alpha, k}} \hat{S}_{\alpha, k; q}(t) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha, k; q}^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{ \hat{S}_{\alpha, k; q}^\dagger(t) \hat{S}_{\alpha, k; q}(t), \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \} \right], \end{aligned}$$

que corresponde a la ecuación 2.9.

A.5. Condición KMS y funciones correlación espectral

Para empezar, se definirá una función correlación auxiliar que consiste en

$$\begin{aligned}
C_{kk}^{\alpha N}(s) &= \langle \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger(s) \hat{B}_{\alpha,k} \rangle_N \\
&= \text{Tr} \{ e^{is(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger e^{-is(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)} \hat{B}_{\alpha,k} \hat{\tau}_\alpha \} \\
&= \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ \hat{B}_{\alpha,k} e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)} e^{is(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger e^{-is(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)} \} \\
&= \text{Tr} \{ \hat{B}_{\alpha,k} e^{i(s+i\beta_\alpha)(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger e^{-i(s+i\beta_\alpha)(\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha)} \hat{\tau}_\alpha \} \\
&= \langle \hat{B}_{\alpha,k} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger(s+i\beta_\alpha) \rangle_N,
\end{aligned}$$

que se relaciona con la función correlación de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
C_{kk}^{\alpha N}(s) &= \text{Tr} \{ e^{-is\mu_\alpha \hat{N}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger(s) e^{is\mu_\alpha \hat{N}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,k} e^{-is\mu_\alpha \hat{N}_\alpha} \hat{\tau}_\alpha \} \\
&= \text{Tr} \{ \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger(s) e^{is\mu_\alpha \hat{N}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,k} e^{-is\mu_\alpha \hat{N}_\alpha} \hat{\tau}_\alpha \} \\
&= e^{-i\mu_\alpha n_{\alpha,k} s} C_{kk}^\alpha(s).
\end{aligned}$$

Las funciones correlación espectral, pueden expresarse mediante las funciones correlación auxiliares

$$\begin{aligned}
\gamma_k^\alpha(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\mu_\alpha n_{\alpha,k} s} e^{i\omega s} C_{k,k}^{\alpha N}(s) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\mu_\alpha n_{\alpha,k} s} e^{i\omega s} \langle \hat{B}_{\alpha,k} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger(s+i\beta_\alpha) \rangle_N \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-i(i\beta_\alpha \mu_\alpha n_{\alpha,k})} e^{i\omega s} \langle \hat{B}_{\alpha,k} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger(s+i\beta_\alpha) \rangle \\
&= e^{\beta_\alpha \mu_\alpha n_{\alpha,k}} e^{\beta_\alpha \omega} \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega(s+i\beta_\alpha)} \langle \hat{B}_{\alpha,k} \hat{B}_{\alpha,k}^\dagger(s+i\beta_\alpha) \rangle \\
&= e^{\beta_\alpha(\omega - \mu_\alpha n_{\alpha,k})} \gamma_k^\alpha(-\omega).
\end{aligned}$$

Esta relación es importante, pues garantiza el cumplimiento de la condición de balance detallado local.

A.6. Ley cero

Para demostrar la ley cero, se evaluarán los disipadores $\mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}]$ y $\mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger]$ en el estado de Gibbs. Para ello, primero se debe considerar la relación de conmutación

$$\begin{aligned} [\hat{S}_{\alpha,k;q}, (\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)] &= (\omega_q - \mu_\alpha n_{\alpha,k}) \hat{S}_{\alpha,k;q} \\ [\hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger, (\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)] &= -(\omega_q - \mu_\alpha n_{\alpha,k}) \hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger. \end{aligned}$$

Así, encontramos que

$$\begin{aligned} e^{\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} \hat{S}_{\alpha,k;q} e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} &= \hat{S}_{\alpha,k;q} e^{-\beta_\alpha(\omega_q - \mu_\alpha n_{\alpha,k})} \\ e^{\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} \hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} &= \hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger e^{\beta_\alpha(\omega_q - \mu_\alpha n_{\alpha,k})}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, al aplicar el estado de Gibbs en los disipadores

$$\begin{aligned} \mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}] e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} &= e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} \hat{S}_{\alpha,k;q} \hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger e^{-\beta_\alpha(\omega_q - \mu_\alpha n_{\alpha,k})} - e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} \hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger \hat{S}_{\alpha,k;q} \\ \mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger] e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} &= e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} \hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger \hat{S}_{\alpha,k;q} e^{\beta_\alpha(\omega_q - \mu_\alpha n_{\alpha,k})} - e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} \hat{S}_{\alpha,k;q} \hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger, \end{aligned}$$

Al sumar las contribuciones de ambos disipadores en el superoperador de Lindblad \mathcal{L}_α , se obtiene

$$\mathcal{L}_\alpha e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} \propto \mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}] e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} + e^{-\beta_\alpha(\omega_q - \mu_\alpha n_{\alpha,k})} \mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k;q}^\dagger] e^{-\beta_\alpha(\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} = 0.$$

Con lo que se prueba la ley cero.

A.7. Segunda Ley

Para derivar la segunda ley de la termodinámica, se empezará calculando la derivada temporal de la entropía de Von Neumann

$$\begin{aligned}
-\frac{d}{dt}\text{Tr}\{\hat{\rho}_S(t) \ln \hat{\rho}_S(t)\} &= -\text{Tr}\left\{\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) \ln \hat{\rho}_S(t)\right\} - \frac{d}{dt}\text{Tr}\{\hat{\rho}_S(t)\} \\
&= -i\text{Tr}\{[\hat{H}_S + \hat{H}_{LS}, \hat{\rho}_S(t)] \ln \hat{\rho}_S(t)\} - \sum_{\alpha} \text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha}\hat{\rho}_S(t)) \ln \hat{\rho}_S(t)\} \\
&= -\sum_{\alpha} \text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha}\hat{\rho}_S(t)) \ln \hat{\rho}_S(t)\}.
\end{aligned}$$

Por otro lado, el flujo de calor consiste en

$$\begin{aligned}
J_{\alpha} &= \text{Tr}\{(\hat{H}_{TD} - \mu_{\alpha}\hat{N}_S)\mathcal{L}_{\alpha}(\hat{\rho}_S(t))\} \\
&= -\frac{1}{\beta_{\alpha}}\text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha}\hat{\rho}_S(t)) \ln \hat{\rho}_G(\beta_{\alpha}, \mu_{\alpha})\} + \frac{\text{Tr}\{e^{-\beta_{\alpha}(\hat{H}_{TD} - \mu_{\alpha}\hat{N}_S)}\}}{\beta_{\alpha}}\text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha}\hat{\rho}_S(t))\} \\
&= -\frac{1}{\beta_{\alpha}}\text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha}\hat{\rho}_S(t)) \ln \hat{\rho}_G(\beta_{\alpha}, \mu_{\alpha})\}.
\end{aligned}$$

Así, utilizando la desigualdad de Spohn se redefine la segunda ley de la termodinámica como

$$\dot{\sigma} = -\sum_{\alpha} \text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha}\hat{\rho}_S(t))[\ln \hat{\rho}_S(t) - \ln \hat{\rho}_G(\beta_{\alpha}, \mu_{\alpha})]\} \geq 0.$$

Finalmente, se obtiene que la tasa de producción de entropía es siempre mayor igual a cero.

Anexo B. Cálculos realizados sección 3

B.1. Producción de entropía y información

Inicialmente, se considerará la definición de la entropía conjunta para dos variables aleatorias discretas X e Y

$$S^{XY} = - \sum_{x,y} p(x,y) \ln p(x,y), \quad (\text{B.1})$$

donde $p(x,y)$ denota la distribución de probabilidad conjunta de X e Y . Al derivar temporalmente la expresión B.1 y utilizar la propiedad de antisimetría de la corriente de probabilidades, $J_{x,x'}^{y,y'} = -J_{x',x}^{y',y}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \partial_t S^{XY} &= - \sum_{x,y} \dot{p}(x,y) \ln p(x,y) - \sum_{x,y} \dot{p}(x,y) \\ &= - \sum_{x,x';y,y'} J_{x,x'}^{y,y'} \ln p(x,y) \\ &= \sum_{x \geq x'; y \geq y'} J_{x,x'}^{y,y'} \ln \frac{p(x',y')}{p(x,y)} \\ &= \sum_{x \geq x'; y \geq y'} J_{x,x'}^{y,y'} \ln \frac{W_{x,x'}^{y,y'} p(x',y')}{W_{x',x}^{y',y} p(x,y)} + \sum_{x \geq x'; y \geq y'} J_{x,x'}^{y,y'} \ln \frac{W_{x',x}^{y',y}}{W_{x,x'}^{y,y'}} \\ &= \dot{\sigma} - \dot{S}_r. \end{aligned}$$

Para demostrar que la producción de entropía es no negativa, obsérvese que si $J_{x,x'}^{y,y'} > 0$, entonces se cumple que

$$W_{x,x'}^{y,y'} p(x',y') > W_{x',x}^{y',y} p(x,y),$$

y por lo tanto, el cociente

$$\frac{W_{x,x'}^{y,y'} p(x',y')}{W_{x',x}^{y',y} p(x,y)} > 1,$$

lo que implica que su logaritmo es positivo. Como el término correspondiente a la producción de entropía es proporcional a $J_{x,x'}^{y,y'} \ln \left(\frac{W_{x,x'}^{y,y'} p(x',y')}{W_{x',x}^{y',y} p(x,y)} \right)$, cada uno de estos términos contribuye positivamente, y por simetría de los índices se concluye que la suma total es mayor o igual a cero.

Por su parte, la derivada temporal de la información mutua se expresa como

$$\partial_t I_{XY} = \sum_{x,y} \dot{p}(x,y) \ln \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} + \sum_{x,y} p(x,y) \frac{\partial}{\partial t} \left(\ln \frac{1}{p(x)p(y)} \right),$$

donde, al derivar el logaritmo, se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\ln \frac{1}{p(x)p(y)} \right) = - \left(\frac{\dot{p}(x)}{p(x)} + \frac{\dot{p}(y)}{p(y)} \right),$$

por lo que

$$\partial_t I_{XY} = \sum_{x,y} \dot{p}(x,y) \ln \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} - \sum_{x,y} p(x,y) \left(\frac{\dot{p}(x)}{p(x)} + \frac{\dot{p}(y)}{p(y)} \right).$$

Reescribiendo los últimos términos con ayuda de la identidad $\sum_y p(x,y) = p(x)$ y la conservación de la probabilidad ($\sum_x \dot{p}(x) = 0$), se llega a

$$\partial_t I_{XY} = \sum_{x,y} \dot{p}(x,y) \ln \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}. \quad (\text{B.2})$$

Utilizando la definición de corriente de probabilidad $J_{x,x'}^{y,y'}$, se puede reescribir como

$$\partial_t I_{XY} = \sum_{x,x';y,y'} J_{x,x'}^{y,y'} \ln \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}. \quad (\text{B.3})$$

Separando la dinámica de X e Y , se obtiene

$$\partial_t I_{XY} = \sum_{x,x';y} J_{x,x'}^y \ln \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} + \sum_{x;y,y'} J_x^{y,y'} \ln \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}.$$

Agrupando términos simétricos mediante pares ordenados $x \geq x'$ e $y \geq y'$, se llega a

$$\begin{aligned} \partial_t I_{XY} = & \sum_{x \geq x'; y} J_{x,x'}^y \left[\ln \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} - \ln \frac{p(x',y)}{p(x')p(y)} \right] \\ & + \sum_{x; y \geq y'} J_x^{y,y'} \left[\ln \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} - \ln \frac{p(x,y')}{p(x)p(y')} \right]. \end{aligned}$$

Utilizando la regla de Bayes $p(x,y) = p(x)p(y|x) = p(y)p(x|y)$, se simplifica como

$$\partial_t I_{XY} = \sum_{x \geq x'; y} J_{x,x'}^y \ln \frac{p(y|x)}{p(y|x')} + \sum_{x; y \geq y'} J_x^{y,y'} \ln \frac{p(x|y)}{p(x|y')}.$$

Esta expresión permite interpretar la variación de la información mutua como la suma de dos flujos:

$$\partial_t I_{XY} = \dot{I}_X + \dot{I}_Y,$$

donde \dot{I}_X e \dot{I}_Y están dados por 3.2 y 3.3, y representan contribuciones individuales debido a la dinámica en los grados de libertad X e Y , respectivamente.

Anexo C. Cálculos realizados seccion 4

C.1. Funciones de correlación para un baño de fermiones libres

Para obtener las funciones de correlación espectral, se comenzará escribiendo las funciones correlación temporal

$$C_1^\alpha(s) = \text{Tr}[e^{is\hat{H}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,1}^\dagger e^{-is\hat{H}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,1} \hat{\tau}_\alpha] \quad C_{-1}^\alpha(s) = \text{Tr}[e^{is\hat{H}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,-1}^\dagger e^{-is\hat{H}_\alpha} \hat{B}_{\alpha,-1} \hat{\tau}_\alpha].$$

Reescribiendo las funciones correlación en función de los operadores fermionicos, se tiene

$$C_1^\alpha(s) = \sum_{l,l'} t_{\alpha,l} t_{\alpha,l'} e^{i\epsilon_{\alpha,l}s} \langle \hat{c}_{\alpha,l}^\dagger \hat{c}_{\alpha,l'} \rangle \quad C_{-1}^\alpha(s) = \sum_{l,l'} t_{\alpha,l} t_{\alpha,l'} e^{-i\epsilon_{\alpha,l}s} \langle \hat{c}_{\alpha,l} \hat{c}_{\alpha,l'}^\dagger \rangle.$$

En el equilibrio gran canónico, el valor de expectación $\langle \hat{c}_{\alpha,l}^\dagger \hat{c}_{\alpha,l} \rangle$ es la distribución de Fermi $f_\alpha(\epsilon_{\alpha,l})$. Por lo tanto

$$C_1^\alpha(s) = \sum_l t_{\alpha,l}^2 e^{i\epsilon_{\alpha,l}s} f_\alpha(\epsilon_{\alpha,l}) \quad C_{-1}^\alpha(s) = \sum_l t_{\alpha,l}^2 e^{-i\epsilon_{\alpha,l}s} [1 - f_\alpha(\epsilon_{\alpha,l})],$$

luego, si se define la tasa de túnel correspondiente al baño α como

$$\kappa_\alpha(\omega) = 2\pi \sum_l t_{\alpha,l}^2 \delta(\omega - \epsilon_{\alpha,l}),$$

en términos de dicha tasa y de la distribución de ocupación del reservorio $f_\alpha(\omega)$, se pueden reescribir las funciones de correlación en forma integral como

$$C_1^\alpha(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega s} \kappa_\alpha(\omega) f_\alpha(\omega) \\ C_{-1}^\alpha(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega s} \kappa_\alpha(\omega) [1 - f_\alpha(\omega)].$$

A partir de estas expresiones temporales, se puede obtener la forma espectral de las funciones de correlación a través de la transformada de Fourier

$$\gamma_1^\alpha(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} C_1^\alpha(s) = \kappa_\alpha(-\omega) f_\alpha(-\omega) \\ \gamma_{-1}^\alpha(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} C_{-1}^\alpha(s) = \kappa_\alpha(\omega) [1 - f_\alpha(\omega)].$$

Estas funciones espectrales codifican tanto la densidad de estados accesibles del entorno como su grado de ocupación.

Más adelante, se abordará en detalle el régimen Markoviano, discutiendo bajo qué condiciones las funciones de correlación se aproximan por distribuciones localizadas temporalmente, y cómo esto permite simplificar el tratamiento dinámico del sistema.

C.2. Operadores de salto de sistema de 3 puntos cuánticos

Para partir, se considerará un sistema de 3 puntos cuánticos, con Hamiltoniano \hat{H}_S

$$\hat{H}_S = \epsilon_R \hat{n}_R + \epsilon_L \hat{n}_L + \epsilon_D \hat{n}_D + g(\hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L + \hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R) + U \hat{n}_D(\hat{n}_R + \hat{n}_L) + U_f \hat{n}_R \hat{n}_L,$$

Para identificar los operadores de salto, primeramente se elimina el término de acoplamiento en el Hamiltoniano \hat{H}_S , mediante la transformación unitaria

$$\begin{aligned}\hat{d}_- &= \cos(\theta/2) \hat{d}_R - \sin(\theta/2) \hat{d}_L \\ \hat{d}_+ &= \sin(\theta/2) \hat{d}_R + \cos(\theta/2) \hat{d}_L,\end{aligned}$$

con

$$\cos \theta = \Delta / \sqrt{\Delta^2 + g^2} \quad \Delta = \frac{(\epsilon_L - \epsilon_R)}{2}.$$

Si se invierte la transformación unitaria, se pueden escribir los operadores locales en función de los operadores globales

$$\begin{aligned}\hat{d}_R &= \cos(\theta/2) \hat{d}_- + \sin(\theta/2) \hat{d}_+ \\ \hat{d}_L &= -\sin(\theta/2) \hat{d}_- + \cos(\theta/2) \hat{d}_+.\end{aligned}$$

Esto implica que los operadores de número locales se pueden expresar como

$$\begin{aligned}\hat{d}_R^\dagger \hat{d}_R &= \cos^2(\theta/2) \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_- + \sin^2(\theta/2) \hat{d}_+^\dagger \hat{d}_+ + \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) [\hat{d}_+^\dagger \hat{d}_- + \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_+] \\ \hat{d}_L^\dagger \hat{d}_L &= \sin^2(\theta/2) \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_- + \cos^2(\theta/2) \hat{d}_+^\dagger \hat{d}_+ - \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) [\hat{d}_+^\dagger \hat{d}_- + \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_+],\end{aligned}$$

por lo tanto

$$\hat{n}_L + \hat{n}_R = \hat{n}_+ + \hat{n}_-. \quad (\text{C.1})$$

Usando la relación C.1 y la cantidad definida por $\bar{\epsilon} = (\epsilon_R + \epsilon_L)/2$, se obtiene

$$\epsilon_R \hat{n}_R + \epsilon_L \hat{n}_L = \bar{\epsilon}(\hat{n}_+ + \hat{n}_-) - \Delta \sin(\theta) [\hat{d}_+^\dagger \hat{d}_- + \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_+] - \Delta \cos(\theta) [\hat{d}_-^\dagger \hat{d}_- - \hat{d}_+^\dagger \hat{d}_+]. \quad (\text{C.2})$$

Complementariamente

$$\hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L = \cos^2(\theta/2) \hat{d}_+^\dagger \hat{d}_- - \sin^2(\theta/2) \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_+ + \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) [\hat{d}_+^\dagger \hat{d}_+ - \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_-] \quad (\text{C.3})$$

$$\hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R = \cos^2(\theta/2) \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_+ - \sin^2(\theta/2) \hat{d}_+^\dagger \hat{d}_- + \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) [\hat{d}_+^\dagger \hat{d}_+ - \hat{d}_-^\dagger \hat{d}_-]. \quad (\text{C.4})$$

De la combinación de C.2, C.3 y C.4 se puede mostrar que

$$\epsilon_R \hat{n}_R + \epsilon_L \hat{n}_L + g(\hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R + \hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L) = (\bar{\epsilon} + \sqrt{\Delta^2 + g^2}) \hat{n}_+ + (\bar{\epsilon} - \sqrt{\Delta^2 + g^2}) \hat{n}_-.$$

Para trabajar el término de Coulomb en el Hamiltoniano, se aplicará que los operadores de Fermi cumplen $\hat{n}_i^2 = \hat{n}_i$, así el término de Coulomb

$$\begin{aligned} 2\hat{n}_R \hat{n}_L &= (\hat{n}_R + \hat{n}_L)(\hat{n}_R + \hat{n}_L) - (\hat{n}_R + \hat{n}_L) \\ &= (\hat{n}_+ + \hat{n}_-)(\hat{n}_+ + \hat{n}_-) - (\hat{n}_+ + \hat{n}_-) = 2\hat{n}_+ \hat{n}_-. \end{aligned}$$

Finalmente, se definen las energías $\epsilon_\pm = \bar{\epsilon} \pm \sqrt{\Delta^2 + g^2}$ para escribir el Hamiltoniano en la base global, dado por

$$\hat{H}_S = \epsilon_D \hat{n}_D + \epsilon_+ \hat{n}_+ + \epsilon_- \hat{n}_- + U \hat{n}_D (\hat{n}_+ + \hat{n}_-) + U_f \hat{n}_+ \hat{n}_-. \quad (\text{C.5})$$

El escribir el Hamiltoniano en función de la base global, permite calcular los operadores de salto, que están dados por

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_D e^{-i\hat{H}_S t} &= \hat{d}_D + it[\hat{H}_S, \hat{d}_D] + \frac{(it)^2}{2} [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, \hat{d}_D]] + \dots \\ e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_+ e^{-i\hat{H}_S t} &= \hat{d}_+ + it[\hat{H}_S, \hat{d}_+] + \frac{(it)^2}{2} [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, \hat{d}_+]] + \dots \\ e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_- e^{-i\hat{H}_S t} &= \hat{d}_- + it[\hat{H}_S, \hat{d}_-] + \frac{(it)^2}{2} [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, \hat{d}_-]] + \dots \end{aligned}$$

Para calcular los operadores de salto correspondientes al operador \hat{d}_D , se usará la identidad

$$\mathbf{1} = (\mathbf{1} - \hat{n}_+)(\mathbf{1} - \hat{n}_-) + (\mathbf{1} - \hat{n}_+) \hat{n}_- + (\mathbf{1} - \hat{n}_-) \hat{n}_+ + \hat{n}_+ \hat{n}_-,$$

al utilizar esta identidad y la relación $(\mathbf{1} - \hat{n}_i) \hat{n}_i = \mathbf{0}$. El conmutador $[\hat{H}_S, \hat{d}_D]$ se puede separar en los términos

$$\begin{aligned} [\hat{H}_S, \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_+) (\mathbf{1} - \hat{n}_-)] &= -\epsilon_D \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_+) (\mathbf{1} - \hat{n}_-) \\ [\hat{H}_S, \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_+) \hat{n}_-] &= -(\epsilon_D + U) \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_+) \hat{n}_- \\ [\hat{H}_S, \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_-) \hat{n}_+] &= -(\epsilon_D + U) \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_-) \hat{n}_+ \\ [\hat{H}_S, \hat{d}_D \hat{n}_+ \hat{n}_-] &= -(\epsilon_D + 2U) \hat{d}_D \hat{n}_+ \hat{n}_-, \end{aligned}$$

al aplicar nuevamente el conmutador

$$\begin{aligned} [\hat{H}_S, [\hat{H}_S, \hat{d}_D]] &= (\epsilon_D)^2 \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_+) (\mathbf{1} - \hat{n}_-) + (\epsilon_D + U)^2 \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_+) \hat{n}_- \\ &\quad + (\epsilon_D + U)^2 \hat{d}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_-) \hat{n}_+ + (\epsilon_D + 2U)^2 \hat{d}_D \hat{n}_+ \hat{n}_-. \end{aligned}$$

Finalmente

$$e^{i\hat{H}st}\hat{d}_De^{-i\hat{H}st} = e^{-i\epsilon_D t}\hat{d}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_+)(\mathbf{1} - \hat{n}_-) + e^{-i(\epsilon_D+U)t}\hat{d}_D[(\mathbf{1} - \hat{n}_+)\hat{n}_- + (\mathbf{1} - \hat{n}_-)\hat{n}_+] \\ + e^{-i(\epsilon_D+2U)t}\hat{d}_D\hat{n}_+\hat{n}_-.$$

Para calcular los operadores de salto de \hat{d}_+ , se usará la identidad

$$\mathbf{1} = (\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_-) + (\mathbf{1} - \hat{n}_-)\hat{n}_D + (\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_- + \hat{n}_D\hat{n}_-,$$

así, los conmutadores que incluyen \hat{d}_+ se podrán separar en

$$\begin{aligned} [\hat{H}_S, \hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_-)] &= -\epsilon_+\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_-) \\ [\hat{H}_S, \hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_-] &= -(\epsilon_+ + U)\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-)\hat{n}_D \\ [\hat{H}_S, \hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-)\hat{n}_D] &= -(\epsilon_+ + U_f)\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_- \\ [\hat{H}_S, \hat{d}_+\hat{n}_D\hat{n}_-] &= -(\epsilon_+ + U + U_f)\hat{d}_+\hat{n}_D\hat{n}_-, \end{aligned}$$

aplicando recursivamente estos conmutadores, se obtiene la expresión para los operadores de salto

$$e^{i\hat{H}st}\hat{d}_+e^{-i\hat{H}st} = e^{-i\epsilon_+t}\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_-) + e^{-i(\epsilon_++U_f)t}\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_- \\ + e^{-i(\epsilon_++U)t}\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-)\hat{n}_D + e^{-i(\epsilon_++U+U_f)t}\hat{d}_+\hat{n}_-\hat{n}_D,$$

debido a la simetría entre los operadores de la base global \hat{d}_+ y \hat{d}_- , los operadores de salto de \hat{d}_- son

$$e^{i\hat{H}st}\hat{d}_-e^{-i\hat{H}st} = e^{-i\epsilon_-t}\hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_+) + e^{-i(\epsilon_-+U_f)t}\hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_+ \\ + e^{-i(\epsilon_-+U)t}\hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_+)\hat{n}_D + e^{-i(\epsilon_-+U+U_f)t}\hat{d}_-\hat{n}_+\hat{n}_D.$$

Por su parte, se pueden expresar los operadores de salto en la base local \hat{d}_L y \hat{d}_R como

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}st}\hat{d}_Re^{-i\hat{H}st} &= \cos(\theta/2)e^{i\hat{H}st}\hat{d}_-e^{-i\hat{H}st} + \sin(\theta/2)e^{i\hat{H}st}\hat{d}_+e^{-i\hat{H}st}, \\ e^{i\hat{H}st}\hat{d}_Le^{-i\hat{H}st} &= -\sin(\theta/2)e^{i\hat{H}st}\hat{d}_-e^{-i\hat{H}st} + \cos(\theta/2)e^{i\hat{H}st}\hat{d}_+e^{-i\hat{H}st}. \end{aligned}$$

A partir de esto, se identifican las frecuencias de Bohr asociadas a los operadores de creación y destrucción en el sistema

$$\begin{aligned} \hat{d}_D &\rightarrow \{\epsilon_D, \epsilon_D + U, \epsilon_D + 2U\}, \\ \hat{d}_L, \hat{d}_R &\rightarrow \{\epsilon_{\pm}, \epsilon_{\pm} + U, \epsilon_{\pm} + U_f, \epsilon_{\pm} + U + U_f\}. \end{aligned}$$

C.3. Agrupación de frecuencias para 2 puntos cuánticos

En el caso degenerado $\epsilon_L = \epsilon_R = \epsilon$ se tiene que $\epsilon_{\pm} = \epsilon \pm g$. En este régimen, si el parámetro de acoplamiento g es pequeño en comparación con el inverso del tiempo de correlación del baño ($2g \ll 1/\tau_B$), es posible agrupar estas dos frecuencias. La agrupación de frecuencias estará dada por

$$\begin{aligned}(\epsilon_+, \epsilon_-) &\rightarrow \epsilon \\(\epsilon_+ + U, \epsilon_- + U) &\rightarrow \epsilon + U \\(\epsilon_+ + U_f, \epsilon_- + U_f) &\rightarrow \epsilon + U_f \\(\epsilon_+ + U + U_f, \epsilon_- + U + U_f) &\rightarrow \epsilon + U + U_f.\end{aligned}$$

Para determinar los operadores de salto asociados al operador \hat{d}_L en el caso degenerado, se debe considerar la contribución de las transiciones con frecuencias ϵ_+ y ϵ_- . Es decir, se deben sumar las contribuciones correspondientes a los operadores \hat{d}_+ y \hat{d}_- , para formar un único operador efectivo de salto que posee la frecuencia agrupada. Partiremos agrupando operadores para la frecuencia ϵ , por ende se debe calcular

$$\frac{\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_-)}{\sqrt{2}} - \frac{\hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_+)}{\sqrt{2}} = \frac{(\mathbf{1} - \hat{n}_D)}{\sqrt{2}} [\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-) - \hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_+)],$$

además

$$\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-) - \hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_+) = \frac{\hat{d}_L + \hat{d}_R}{\sqrt{2}}(\mathbf{1} - \hat{n}_-) - \frac{\hat{d}_R - \hat{d}_L}{\sqrt{2}}(\mathbf{1} - \hat{n}_+) \quad (\text{C.6})$$

$$= \frac{\hat{d}_L}{\sqrt{2}}(\mathbf{2} - \hat{n}_+ - \hat{n}_-) + \frac{\hat{d}_R}{\sqrt{2}}(\hat{n}_+ - \hat{n}_-) \quad (\text{C.7})$$

$$= \frac{\hat{d}_L}{\sqrt{2}}(\mathbf{2} - \hat{n}_L - \hat{n}_R) + \frac{\hat{d}_R}{\sqrt{2}}(\hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L + \hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R), \quad (\text{C.8})$$

Utilizando $\hat{d}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_L) = \hat{d}_L \hat{d}_L \hat{d}_L^\dagger = 0$ y

$$\hat{d}_R(\hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L + \hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R) = \hat{d}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_R),$$

en C.8, se obtiene la identidad

$$\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-) - \hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_+) = \hat{d}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_R),$$

lo que permite asociar la frecuencia ϵ al operador $\hat{d}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_R)$.

Del mismo modo, para las frecuencias agrupadas $(\epsilon_- + U, \epsilon_+ + U) \rightarrow \epsilon + U$, el operador de salto efectivo queda determinado por

$$\frac{\hat{d}_+ \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_-)}{\sqrt{2}} - \frac{\hat{d}_- \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_+)}{\sqrt{2}} = \hat{d}_L \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_R).$$

Para el caso de frecuencias $(\epsilon_- + U_f, \epsilon_+ + U_f) \rightarrow \epsilon + U_f$, los operadores de salto agrupados son

$$\frac{\hat{d}_+ \hat{n}_- (\mathbf{1} - \hat{n}_D)}{\sqrt{2}} - \frac{\hat{d}_- \hat{n}_+ (\mathbf{1} - \hat{n}_D)}{\sqrt{2}} = \frac{(\mathbf{1} - \hat{n}_D)}{\sqrt{2}} [\hat{d}_+ \hat{n}_- - \hat{d}_- \hat{n}_+],$$

donde la cantidad $[\hat{d}_+ \hat{n}_- - \hat{d}_- \hat{n}_+]$ es

$$\begin{aligned} \hat{d}_+ \hat{n}_- - \hat{d}_- \hat{n}_+ &= \frac{\hat{d}_R + \hat{d}_L}{\sqrt{2}} \hat{n}_- - \frac{\hat{d}_R - \hat{d}_L}{\sqrt{2}} \hat{n}_+ \\ &= -\frac{\hat{d}_R}{\sqrt{2}} (\hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L + \hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R) + \frac{\hat{d}_L}{\sqrt{2}} (\hat{n}_L + \hat{n}_R) \\ &= \frac{2\hat{d}_L}{\sqrt{2}} \hat{n}_R - \frac{\hat{d}_L}{\sqrt{2}} (\mathbf{1} - \hat{n}_L) \\ &= \frac{2\hat{d}_L}{\sqrt{2}} \hat{n}_R. \end{aligned}$$

Lo que permite asociar la frecuencia $\epsilon + U_f$ al operador $\hat{d}_L \hat{n}_R (\mathbf{1} - \hat{n}_D)$.

Finalmente, para las frecuencias agrupadas $(\epsilon_- + U + U_f, \epsilon_+ + U + U_f) \rightarrow \epsilon + U + U_f$, el operador de salto efectivo es

$$\frac{\hat{d}_+ \hat{n}_D \hat{n}_-}{\sqrt{2}} - \frac{\hat{d}_- \hat{n}_D \hat{n}_+}{\sqrt{2}} = \hat{d}_L \hat{n}_D \hat{n}_R.$$

En recapitulación, al agrupar las frecuencias los operadores de salto estan dados por

$$\begin{aligned} \epsilon &\rightarrow \hat{d}_L (\mathbf{1} - \hat{n}_R) (\mathbf{1} - \hat{n}_D) \\ \epsilon + U &\rightarrow \hat{d}_L \hat{n}_D (\mathbf{1} - \hat{n}_R) \\ \epsilon + U_f &\rightarrow \hat{d}_L \hat{n}_R (\mathbf{1} - \hat{n}_D) \\ \epsilon + U + U_f &\rightarrow \hat{d}_L \hat{n}_D \hat{n}_R. \end{aligned}$$

Análogamente, en el caso del operador local \hat{d}_R , se procede agrupando las energías (ϵ_+, ϵ_-) , es decir calcular

$$\frac{\hat{d}_+ (\mathbf{1} - \hat{n}_D) (\mathbf{1} - \hat{n}_-)}{\sqrt{2}} + \frac{\hat{d}_- (\mathbf{1} - \hat{n}_D) (\mathbf{1} - \hat{n}_+)}{\sqrt{2}} = \frac{(\mathbf{1} - \hat{n}_D)}{\sqrt{2}} [\hat{d}_+ (\mathbf{1} - \hat{n}_-) + \hat{d}_- (\mathbf{1} - \hat{n}_+)],$$

además

$$\begin{aligned}
\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-) + \hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_+) &= \frac{\hat{d}_R + \hat{d}_L}{\sqrt{2}}(\mathbf{1} - \hat{n}_-) + \frac{\hat{d}_R - \hat{d}_L}{\sqrt{2}}(\mathbf{1} - \hat{n}_+) \\
&= \frac{\hat{d}_R}{\sqrt{2}}(\mathbf{2} - (\hat{n}_L + \hat{n}_R)) + \frac{\hat{d}_L}{\sqrt{2}}(\hat{n}_+ - \hat{n}_-) \\
&= \frac{\hat{d}_R}{\sqrt{2}}(\mathbf{1} - \hat{n}_R) + \frac{\hat{d}_L}{\sqrt{2}}(\hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L + \hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R) \\
&= \sqrt{2} \hat{d}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_R),
\end{aligned}$$

por lo tanto, el operador de salto asociado a la agrupación $(\epsilon_+, \epsilon_-) \rightarrow \epsilon$ es $\hat{d}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_L)$. De manera análoga, al calcular el operador correspondiente a la agrupación de frecuencias $(\epsilon_+ + U, \epsilon_- + U)$

$$\frac{\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-)\hat{n}_D}{\sqrt{2}} + \frac{\hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_+)\hat{n}_D}{\sqrt{2}} = \hat{d}_R \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_L).$$

Para las frecuencias $(\epsilon_+ + U_f, \epsilon_- + U_f) \rightarrow \epsilon + U_f$, se tendrán que sumar los operadores

$$\frac{\hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_-}{\sqrt{2}} + \frac{\hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_+}{\sqrt{2}} = \frac{(\mathbf{1} - \hat{n}_D)}{\sqrt{2}}[\hat{d}_+\hat{n}_- + \hat{d}_-\hat{n}_+],$$

donde, el operador $\hat{d}_+\hat{n}_- + \hat{d}_-\hat{n}_+$ es

$$\begin{aligned}
\hat{d}_+\hat{n}_- + \hat{d}_-\hat{n}_+ &= \frac{\hat{d}_R + \hat{d}_L}{\sqrt{2}}\hat{n}_- + \frac{\hat{d}_R - \hat{d}_L}{\sqrt{2}}\hat{n}_+ \\
&= \frac{\hat{d}_R}{\sqrt{2}}(\hat{n}_L + \hat{n}_R) - \frac{\hat{d}_L}{\sqrt{2}}(\hat{d}_L^\dagger \hat{d}_R + \hat{d}_R^\dagger \hat{d}_L) \\
&= \sqrt{2} \hat{d}_R \hat{n}_L,
\end{aligned}$$

en consecuencia, el operador de salto de \hat{d}_R al agrupar las frecuencias $(\epsilon_+ + U_f, \epsilon_- + U_f)$ es $\hat{d}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_L$; realizando el mismo procedimiento, se encuentra que para las frecuencias $(\epsilon_+ + U + U_f, \epsilon_- + U + U_f)$ el operador de salto corresponde a $\hat{d}_R \hat{n}_D \hat{n}_L$. Por ende, recapitulando, para el operador \hat{d}_R se tiene

$$\begin{aligned}
\epsilon &\rightarrow \hat{d}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_L)(\mathbf{1} - \hat{n}_D) \\
\epsilon + U &\rightarrow \hat{d}_R \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_L) \\
\epsilon + U_f &\rightarrow \hat{d}_R \hat{n}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_D) \\
\epsilon + U + U_f &\rightarrow \hat{d}_R \hat{n}_D \hat{n}_L.
\end{aligned}$$

C.4. Aspecto Markoviano de las funciones correlación

Para que el sistema descrito en la sección 4.3 exhiba un comportamiento análogo al de un Demonio de Maxwell autónomo, es necesario que las tasas de túnel $\kappa_i(\omega)$ respondan de manera diferenciada dependiendo de si el sitio D se encuentra ocupado o desocupado. Sin embargo, no toda dependencia funcional de $\kappa_i(\omega)$ garantiza un comportamiento Markoviano del sistema. Esta condición puede evaluarse mediante el cálculo explícito de las funciones de correlación del reservorio, ya que el carácter Markoviano se encuentra fuertemente ligado al tiempo de correlación característico del entorno, denotado por τ_B . Para analizar este aspecto, se requiere calcular las funciones de correlación correspondientes a un entorno fermiónico, las cuales, en general, adoptan la forma

$$C_i^\sigma(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} \kappa_i(\omega) f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)),$$

donde $f_F(x) = (\exp(x) + 1)^{-1}$, $i = L, R$ y $\sigma = \pm$.

La distribución de Fermi puede ser calculada mediante aproximantes de Padé [57, 58], lo que permite expresarla como una sumatoria

$$f_F(x) \approx \frac{1}{2} - \sum_{l=0}^N \frac{2K_l x}{x^2 + \xi_l^2}, \quad (\text{C.9})$$

los coeficientes K_l y ξ_l pueden ser calculados numéricamente y se encuentran tabulados en [57]. Para evaluar numéricamente la función de correlación, es necesario especificar una forma explícita para $\kappa_i(\omega)$, la cual debe presentar un máximo en cierta frecuencia característica ϵ_0 . Una elección común consiste en considerar un perfil lorentziano dado por

$$\kappa_i(\omega) = \kappa_0 + \frac{\kappa_f W^2}{(\omega - \epsilon_0)^2 + W^2},$$

donde W representa el ancho de la lorentziana, κ_0 y κ_f son constantes que controlan la amplitud. En el estudio del Demonio de Maxwell autónomo, es fundamental distinguir dos casos relevantes: cuando el punto cuántico D se encuentra desocupado o ocupado. Esta distinción se refleja en la evaluación de las tasas de túnel en dos frecuencias distintas, ϵ_0 y $\epsilon_0 + U$, tal como se ilustra en la Figura C.1 para las tasas de túnel correspondientes a los baños L y R .

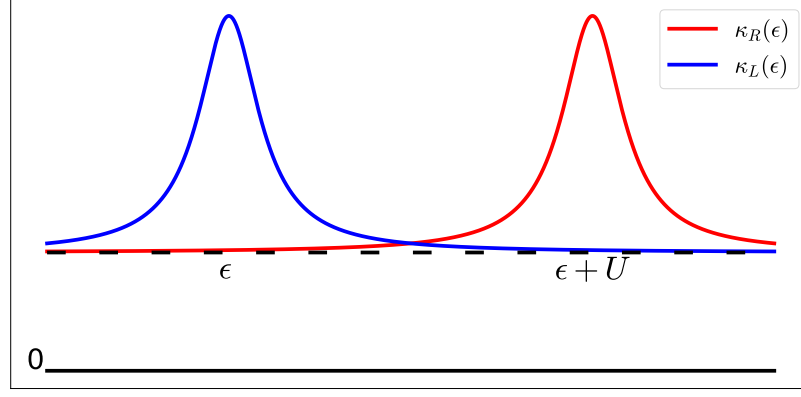


Figura C.1: Tasas de túnel en función de las frecuencias ω .

Para obtener tasas de túnel que satisfagan dichas condiciones, se puede plantear el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}\kappa_i(\epsilon_0) &= \kappa_0 + \kappa_f \\ \kappa_i(\epsilon_0 + U) &= \kappa_0 + \frac{\kappa_f W^2}{U^2 + W^2}.\end{aligned}$$

A partir de estas igualdades, es posible determinar los parámetros κ_0 , κ_f y W . Sustituyendo la expresión de $\kappa_i(\omega)$ en la función de correlación, se obtiene

$$C_i^\sigma(t) = \frac{\kappa_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)) + \frac{\kappa_f}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} \left[\frac{W^2}{(\omega - \epsilon_0)^2 + W^2} \right] f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)),$$

la función de correlación puede descomponerse en dos contribuciones

$$C_0^\sigma(t) = \frac{\kappa_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)) \quad (\text{C.10})$$

$$C_f^\sigma(t) = \frac{\kappa_f}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} \left[\frac{W^2}{(\omega - \epsilon_0)^2 + W^2} \right] f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)), \quad (\text{C.11})$$

y se podrá determinar el tiempo de correlación del baño como $\tau_B = \max\{\tau_{B0}, \tau_{Bf}\}$, donde τ_{B0} es el tiempo de correlación de la parte $C_0^\sigma(t)$ y τ_{Bf} es el tiempo de correlación de la parte $C_f^\sigma(t)$. Se comenzará calculando una expresión analítica aproximada para la función de correlación $C_f^\sigma(t)$. Para resolver la integral de C.11, será necesario localizar los polos en el plano complejo. Según C.9, los polos asociados a la aproximación de Padé se encuentran en $\omega = \pm i\xi_l/\beta + \mu$, mientras que los polos correspondientes a la forma Lorentziana se ubican en $\omega = \pm iW + \omega_0$. Para realizar esta integración, se utilizará el teorema del residuo [59], considerando un contorno de integración en forma de semicírculo en el hemisferio superior o inferior del plano complejo, dependiendo del signo de σ . El residuo asociado a la Lorentziana es

$$\text{Res} \left[\frac{e^{i\sigma\omega t} f_F[\sigma\beta(\omega - \mu)]}{(\omega - \omega_0 + iW)(\omega - \omega_0 - iW)} \right]_{\omega=\pm iW+\omega_0} = \frac{1}{\pm 2iW} (e^{\mp\sigma W t} f_F[\sigma\beta(\pm iW + \omega_0 - \mu)] e^{i\sigma\omega_0 t}).$$

Si se cumple que $\sigma > 0$, se toma como contorno de integración el hemisferio inferior del plano complejo; en cambio, si $\sigma < 0$, se considera el hemisferio superior. De esta manera, se obtiene

$$\text{Res} \left[\frac{e^{i\sigma\omega t} f_F[\sigma\beta(\omega - \mu)]}{(\omega - \omega_0 + iW)(\omega - \omega_0 - iW)} \right]_{\omega=\pm iW+\omega_0} = \frac{1}{2iW} (e^{i\sigma\omega_0 t} e^{-W t} f_F[i\beta W + \sigma\beta(\omega_0 - \mu)]).$$

Para encontrar el residuo asociado a los polos restantes, se deberá calcular

$$\text{Res} \left[\frac{-e^{i\sigma\omega t}}{(\omega - \omega_0)^2 + W^2} \frac{2K_l[\sigma\beta(\omega - \mu)]}{(\beta(\omega - \mu) + i\xi_l)(\beta(\omega - \mu) - i\xi_l)} \right]_{\omega=\pm i\xi_l/\beta+\mu} = \frac{-1}{\beta} \frac{e^{-\frac{\sigma\xi_l}{\beta}t} e^{i\sigma\mu t} (\pm K_l\sigma)}{[\frac{\pm i\xi_l}{\beta} + (\mu - \omega_0)]^2 + W^2},$$

seleccionando la región de integración en función del signo de σ como se hizo anteriormente, se concluye que

$$\text{Res} \left[\frac{-e^{i\sigma\omega t}}{(\omega - \omega_0)^2 + W^2} \frac{2K_l[\sigma\beta(\omega - \mu)]}{(\beta(\omega - \mu) + i\xi_l)(\beta(\omega - \mu) - i\xi_l)} \right]_{\omega=\pm i\xi_l/\beta+\mu} = \frac{-1}{\beta} \frac{e^{-\frac{\xi_l}{\beta}t} e^{i\sigma\mu t} K_l}{[\frac{\sigma i\xi_l}{\beta} + (\mu - \omega_0)]^2 + W^2}.$$

Al encontrar los residuos explícitamente, estos se podrán usar para escribir la función correlación

$$C_f^\sigma(t) \approx \sum_{l=0}^N \eta^{\sigma,l} e^{-\gamma_{\sigma,l} t}, \quad (\text{C.12})$$

donde

$$\eta^{\sigma,l} = \begin{cases} \frac{\kappa_f W}{2} f_F[i\beta W + \sigma\beta(\omega_0 - \mu)] & l = 0 \\ -\frac{iK_l}{\beta} \left(\frac{\kappa_f W^2}{(\frac{i\sigma\xi_l}{\beta} + (\mu - \omega_0))^2 + W^2} \right) & l \neq 0 \end{cases}$$

$$\gamma_{\sigma,l} = \begin{cases} W - \sigma i\omega_0 & l = 0 \\ \frac{\xi_l}{\beta} - \sigma i\mu & l \neq 0 \end{cases}.$$

Esto permite obtener una expresión numérica para la función de correlación $C_f^\sigma(t)$, y con ello evaluar su tiempo de correlación característico, τ_{Bf} . Por otro lado, para la otra función de correlación es posible calcular la integral de forma analítica, es decir, evaluar

$$C_0^\sigma(t) = \frac{\kappa_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)).$$

Se puede observar que este cálculo equivale a obtener la transformada de Fourier

$$\mathcal{F}(f[\sigma(\omega - \mu)])(-\sigma t),$$

de la función

$$f(\sigma(\omega - \mu)) = f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)),$$

empleando la propiedad

$$\mathcal{F}(f[\sigma(\omega - \mu)])(-\sigma t) = e^{-i\sigma\mu t} \mathcal{F}(f[\sigma\omega])(-\sigma t),$$

es decir, podemos centrarnos en calcular la transformación

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(f[\sigma\omega])(-\sigma t) &= \frac{\kappa_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{i\sigma\omega t}}{e^{\sigma\beta\omega} + 1} \\ &= \frac{\kappa_0}{4\pi} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} \tanh\left(\frac{\sigma\beta\omega}{2}\right) \right] \\ &= \frac{\kappa_0}{2} \left[\delta(t) - \frac{i}{\beta\sigma \sinh(\pi t/\beta\sigma)} \right], \end{aligned}$$

así

$$C_0^\sigma(t) = \frac{\kappa_0}{2} e^{-i\sigma\mu t} \left[\delta(t) - \frac{i}{\beta\sigma \sinh(\pi t/\beta\sigma)} \right].$$

Gracias a que se dispone de una expresión analítica para $C_0^\sigma(t)$, es posible determinar el tiempo de correlación τ_{B0} . El análisis se centra principalmente en el término que involucra $\sinh(\pi t/\beta\sigma)$, ya que, dado que $\sigma = \pm 1$, el parámetro relevante es $\pi t/\beta$. Para tiempos $t > \beta$, se puede aproximar que

$$\frac{1}{\sinh(\pi t/\beta\sigma)} \propto e^{-t/\beta},$$

lo que implica que el tiempo de correlación del baño está dado por el inverso de la temperatura, es decir, $\tau_{B0} = \beta$. Por consiguiente, el tiempo de correlación efectivo asociado a un único reservorio queda definido como

$$\tau_B = \max\{\beta, \tau_{Bf}\}.$$

C.5. Cálculo numérico para los tiempos de correlación

Dado que es posible reconstruir las tasas de túnel $\kappa_L(\omega)$ y $\kappa_R(\omega)$ mediante una función de tipo Lorentziana, podemos construir tasas de túnel que cumplen las condiciones $\kappa_L(\epsilon) = \kappa_R(\epsilon + U) = 1/100$ y $\kappa_L(\epsilon + U) = \kappa_R(\epsilon) = 1/600$, y así se pueden calcular numéricamente las

funciones correlación asociadas.

Para determinar los tiempos de correlación τ_{Bf} correspondientes a los baños L y R , se utilizará la expresión C.12 de las funciones correlación. La estimación de τ_{Bf} se realiza identificando el punto donde la función correlación prácticamente se anula. Posteriormente, para evaluar si el comportamiento del sistema es efectivamente markoviano, se debe verificar que $\tau_R \gg \tau_{Bf}$. Con este criterio, se procede al cálculo de las partes real e imaginaria de las funciones de correlación correspondientes a los baños L y R .

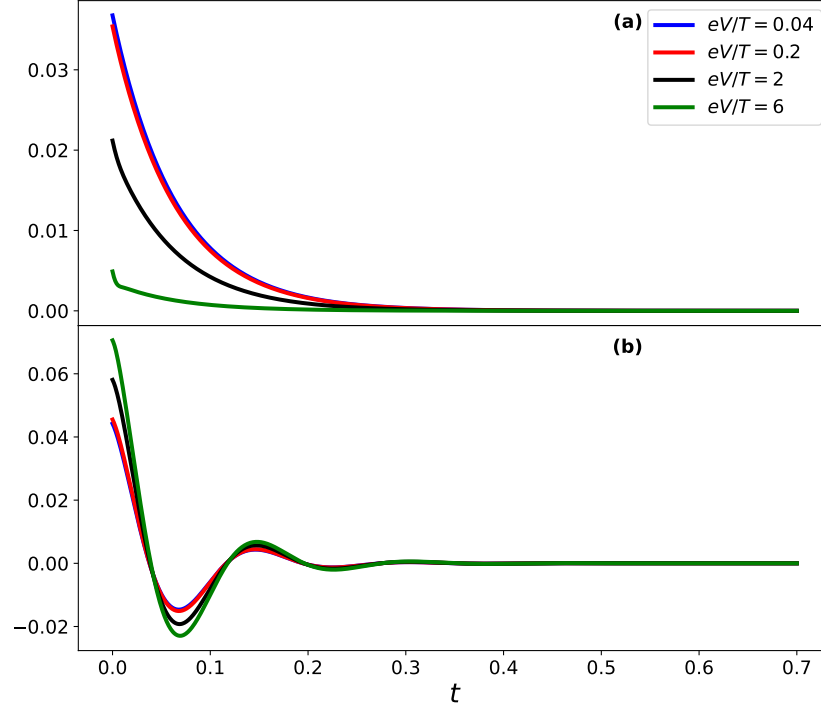


Figura C.2: (a) Parte real de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño L en función del tiempo. (b) Parte real de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño R en función del tiempo.

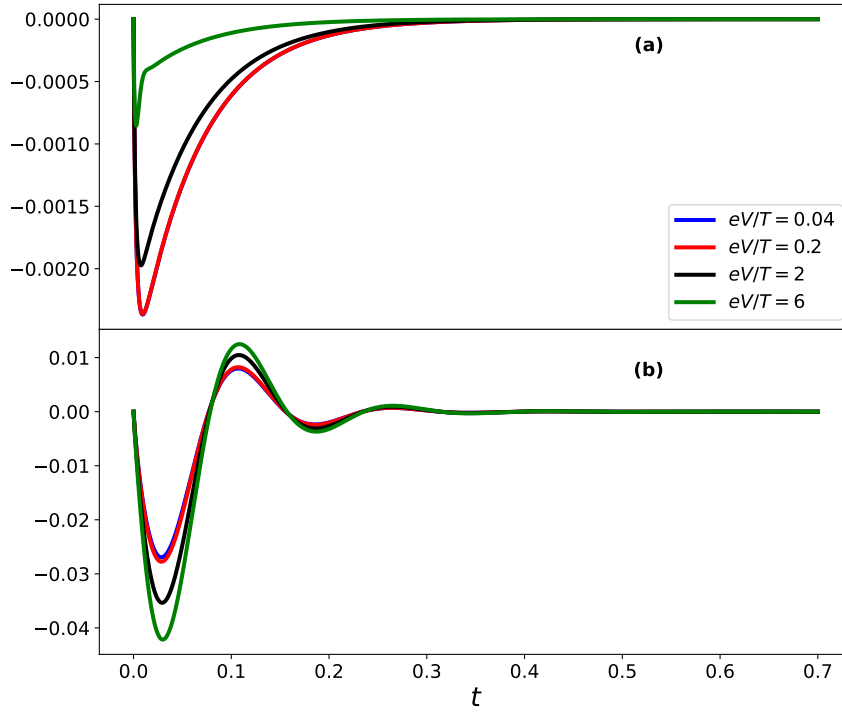


Figura C.3: (a) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño L en función del tiempo. (b) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño R en función del tiempo.

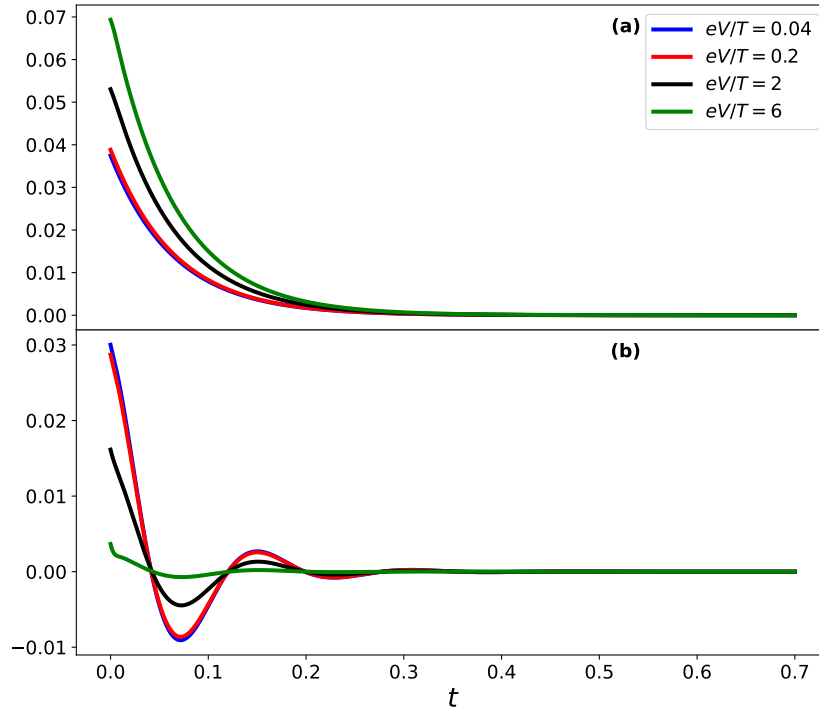


Figura C.4: (a) Parte real de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño L en función del tiempo. (b) Parte real de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño R en función del tiempo.

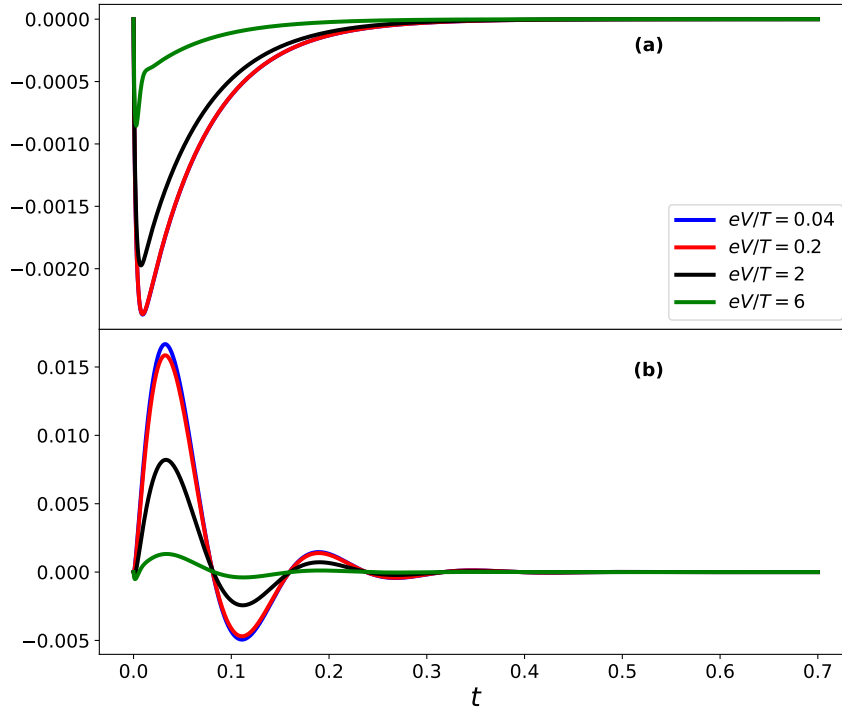


Figura C.5: (a) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño L en función del tiempo. (b) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño R en función del tiempo.

A partir de las Figuras C.2, C.3, C.4 y C.5, se observa que, para $t > 0.4$, las funciones de correlación correspondientes a ambos baños se anulan prácticamente.

Para analizar el carácter markoviano del sistema, se puede comparar este tiempo de correlación con la dinámica de relajación de la matriz densidad hacia el estado estacionario. Para ello, en la Figura C.6 se grafica la evolución temporal de las componentes de la matriz densidad, y se analiza el tiempo característico en que estas alcanzan su régimen estacionario.

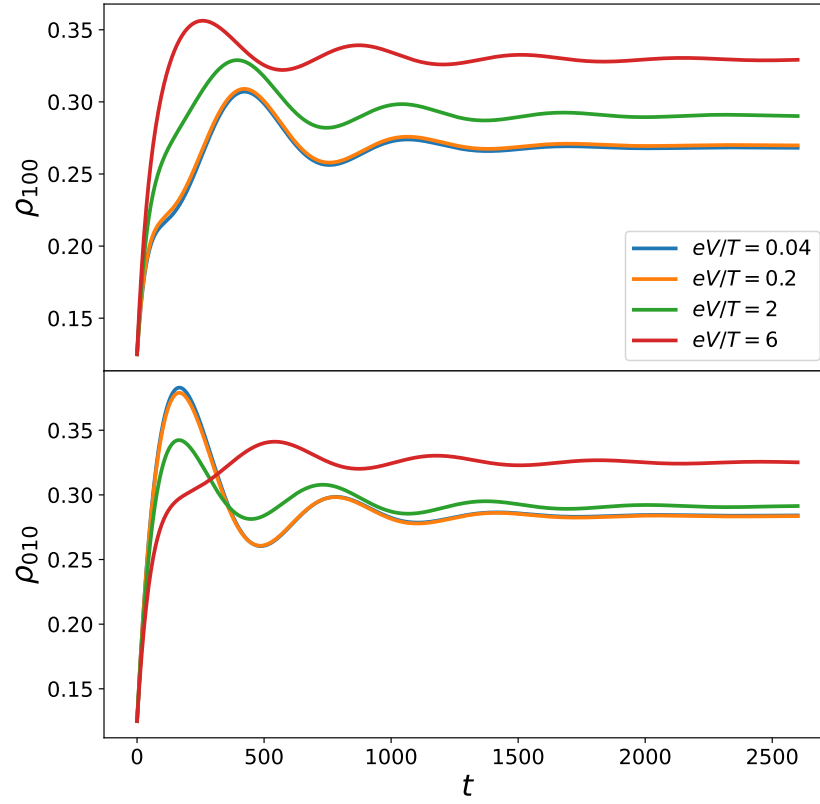


Figura C.6: Componentes ρ_{100} y ρ_{010} de la matriz densidad en función del tiempo, para distintos valores de eV/T .

A partir de la Figura C.6, se observa que el tiempo de relajación del sistema es del orden de $\tau_R > 2000$. Esto permite corroborar que, para distintos valores de eV/T , se cumple la condición $\tau_{Bf}/\tau_R < 0.0002$. Lo que implica que es adecuado realizar la aproximación markoviana para las funciones correlación de los baños L y R .

C.6. Concurrency

En esta sección se presenta la demostración de la fórmula de la concurrency. Para ello, se debe calcular la concurrency en el subsistema $\hat{\rho}_{LR}$, lo que requiere, como primer paso, el cálculo de

$$\hat{\rho}_{LR} = \text{Tr}_D\{\hat{\rho}_S\}.$$

Para escribir la matriz densidad $\hat{\rho}_S$, se utilizará la base

$$\{|0, 0, 0\rangle, |1, 0, 0\rangle, |0, 1, 0\rangle, |0, 0, 1\rangle, |1, 1, 0\rangle, |1, 0, 1\rangle, |0, 1, 1\rangle, |1, 1, 1\rangle\}.$$

En esta representación, la matriz densidad del sistema se expresa como

$$\hat{\rho}_S = \begin{bmatrix} \rho_{000} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{100} & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^* & \rho_{010} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{001} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{110} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{101} & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^* & \rho_{011} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{111} \end{bmatrix}. \quad (\text{C.13})$$

En esta matriz densidad no se observan coherencias entre estados con distinto número total de partículas, lo cual se debe al principio de superselección de carga [60, 61]. Además, dado que el punto cuántico D sólo interactúa con los puntos L y R a través de una interacción de tipo Coulomb, no se generan coherencias del tipo L - D ni R - D .

Es posible obtener la matriz densidad reducida del subsistema LR al proyectar sobre la base $\{|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle\}$

$$\hat{\rho}_{LR} = \begin{bmatrix} \rho_{000} + \rho_{001} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{100} + \rho_{101} & \alpha + \beta & 0 \\ 0 & \alpha^* + \beta^* & \rho_{010} + \rho_{011} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{110} + \rho_{111} \end{bmatrix},$$

de este modo, se podrá calcular la concurrency

$$\mathcal{C}_{on} = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\},$$

donde los λ_i son la raíz cuadrada de los autovalores ordenados en forma decreciente, de la matriz dada por

$$B = \hat{\rho}_{LR} \tilde{\rho}_{LR} \quad \tilde{\rho}_{LR} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \hat{\rho}_{LR} (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (\text{C.14})$$

en la cual σ_y pertenece a las matrices de Pauli. Al aplicar C.14 se obtiene

$$\tilde{\rho}_{LR} = \begin{bmatrix} p_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_R & \alpha + \beta & 0 \\ 0 & \alpha^* + \beta^* & p_L & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_0 \end{bmatrix},$$

con $p_0 = \rho_{000} + \rho_{001}$, $p_L = \rho_{100} + \rho_{101}$, $p_R = \rho_{010} + \rho_{011}$, $p_D = \rho_{110} + \rho_{111}$ y la matriz B es

$$B = \begin{bmatrix} p_0 p_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_L p_R + |\alpha + \beta|^2 & 2(\alpha + \beta) p_L & 0 \\ 0 & 2(\alpha^* + \beta^*) p_R & p_L p_R + |\alpha + \beta|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_0 p_D \end{bmatrix}.$$

Suponiendo que p_D y p_0 son pequeños, el orden decreciente de los autovalores corresponderá a

$$\lambda_1 = p_L p_R + |\alpha + \beta| \quad \lambda_2 = p_L p_R - |\alpha + \beta| \quad \lambda_3 = \lambda_4 = \sqrt{p_0 p_D},$$

entonces se obtiene

$$\mathcal{C}_{on} = \max\{2|\alpha + \beta| - 2\sqrt{p_0 p_D}, 0\}.$$

C.7. Modelo clásico

Para comenzar con la derivación del modelo clásico que describe las componentes diagonales de la matriz densidad ρ_{ijk} , con $i, j, k \in 0, 1$, se parte considerando la ecuación de evolución para los operadores Nakajima-Zwanzig

$$\frac{d}{dt} \check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle \rightarrow \frac{d}{dt} \check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle - \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle,$$

que es equivalente a una ecuación no homogénea lineal de la forma

$$\frac{dy}{dt} - A(t)y = B(t),$$

por lo tanto, se puede solucionar utilizando factor integrante

$$\check{\mu}(t) = \exp\left(-\int_0^t \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f ds\right).$$

Multiplicando por el factor integrante la ecuación diferencial para $\mu(t)$, se obtiene

$$\check{\mu}(t) \frac{d}{dt} \check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle - \check{\mu}(t) \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mu}(t) \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle \rightarrow \frac{d}{dt} (\check{\mu}(t) \check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle) = \check{\mu}(t) \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle,$$

con solución

$$\check{\mu}(t) \check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mu}(0) \check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(0)\rangle\rangle + \int_0^t \check{\mu}(\tau) \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(\tau)\rangle\rangle d\tau, \quad (\text{C.15})$$

multiplicando por $\check{\mu}^{-1}(t)$ ambos lados de la ecuación C.15, se obtiene

$$\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mu}^{-1}(t)\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(0)\rangle\rangle + \int_0^t \check{\mu}^{-1}(t)\check{\mu}(\tau)\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(\tau)\rangle\rangle d\tau, \quad (\text{C.16})$$

luego, se define el operador

$$\check{\mathcal{G}}(t, s) = \exp\left(\int_s^t \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f dt'\right),$$

con este operador se puede reescribir la ecuación C.16 como

$$\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{G}}(t, 0)\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(0)\rangle\rangle + \int_0^t \check{\mathcal{G}}(t, \tau)\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(\tau)\rangle\rangle d\tau.$$

Esto se puede reinsertar en la ecuación principal, obteniéndose así

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{G}}(t, 0)\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(0)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_f \int_0^t \check{\mathcal{G}}(t, \tau)\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(\tau)\rangle\rangle d\tau. \quad (\text{C.17})$$

Estas ecuaciones son exactas, ya que hasta este punto no se ha introducido ninguna aproximación. El primer término del lado derecho de la ecuación C.17 representa la evolución markoviana del sistema, mientras que el segundo y tercer término corresponden, respectivamente, a un corrimiento inicial y a los efectos de memoria inducidos por el acoplamiento con el entorno. Para continuar con la deducción, se utilizarán las siguientes relaciones

$$\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}} = [\check{\mathcal{L}}_0, \check{\mathcal{P}}] = [\check{\mathcal{L}}_0, \check{\mathcal{Q}}] = 0,$$

estas relaciones pueden entenderse de manera intuitiva; dado que $\check{\mathcal{V}}$ representa la perturbación responsable del túnel cuántico entre los puntos L y R , su acción introduce coherencias en la matriz densidad. En particular, al aplicar $\check{\mathcal{V}}$ sobre un estado diagonal, se obtiene una componente no diagonal. Por lo tanto, al aplicar nuevamente el operador de proyección sobre la diagonal $\check{\mathcal{P}}$, esta contribución se anula, es decir, $\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}} = 0$.

Para continuar con el análisis de la ecuación C.17, se harán dos suposiciones, en primer lugar, que el estado inicial no presenta coherencias, es decir, $\check{\mathcal{Q}}\hat{\rho}(0) = 0$; en segundo lugar, se sustituirá explícitamente el operador $\check{\mathcal{L}}_f$ en la ecuación C.17. Con esto, se procederá a evaluar el término integral, utilizando las propiedades de los operadores de proyección de Nakajima-Zwanzig, comenzando por

$$\begin{aligned} \check{\mathcal{G}}(t, \tau) &= \exp\left(\int_\tau^t \check{\mathcal{Q}}(\check{\mathcal{L}}_0 + \check{\mathcal{V}})dt'\right) \\ &= \exp\left(\int_\tau^t \check{\mathcal{Q}}(\check{\mathcal{L}}_0 + \check{\mathcal{V}})(\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}})dt'\right) \\ &= \exp\left(\int_\tau^t [\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{Q}} + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}}] dt'\right), \end{aligned}$$

donde se uso la igualdad

$$\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{P}} = \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0 = 0.$$

A continuación, la ecuación con la parte principal estará dada por

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}(\check{\mathcal{L}}_0 + \check{\mathcal{V}})(\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}}) \int_0^t \check{\mathcal{G}}(t, \tau) \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(\tau)\rangle\rangle d\tau.$$

Debido a la forma del exponencial en $\check{\mathcal{G}}$ al aplicar $\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{G}}(t, \tau)$ se obtiene $\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0(t - \tau)$. Ya que, si extendemos el exponencial

$$\check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0 \exp \left[\int_\tau^t ds \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{Q}} + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} \right] = \check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{P}} \int_\tau^t \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \right) \left[\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{Q}} + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}} + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} \right]^k ds = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0(t - \tau).$$

Posteriormente, esta contribución se anula y la ecuación principal se reduce a

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} \int_0^t \check{\mathcal{G}}(t, \tau) \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(\tau)\rangle\rangle d\tau.$$

Igualmente, el término de la exponencial $\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}}$ no actúa en la ecuación, por ende queda

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} \int_0^t \exp \left[\left(\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{Q}} \right) (t - \tau) \right] \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(\tau)\rangle\rangle d\tau.$$

Al realizar el cambio de variable $\tau \rightarrow t - \tau$

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} \int_0^t \exp \left[\left(\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} + \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{Q}} \right) (\tau) \right] \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t - \tau)\rangle\rangle d\tau,$$

es en este punto donde se introducen las aproximaciones perturbativas. Si se considera que el acoplamiento g es pequeño en comparación con las tasas de disipación κ_i , es decir, $g \ll \kappa_i$, se puede analizar la jerarquía de escalas entre los superoperadores involucrados. En particular, los autovalores del superoperador de interacción $\check{\mathcal{V}}$ serán del orden de g , mientras que los de $\check{\mathcal{L}}_0$ serán del orden de κ_i . Bajo esta suposición, la contribución de $\check{\mathcal{V}}$ dentro del exponencial se puede despreciar, y la evolución estará dada por

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} \int_0^t \exp \left[\left(\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{Q}} \right) \tau \right] \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t - \tau)\rangle\rangle d\tau.$$

Luego, para aplicar aproximación de Markov se supondrá que en escalas de tiempo $1/\kappa_i$ que $\check{\mathcal{P}}\hat{\rho}(t - \tau)$ no varía mucho, así poder considerar $\check{\mathcal{P}}\hat{\rho}(t - \tau) = \check{\mathcal{P}}\hat{\rho}(t)$. Además, en los límites del integral se reemplaza $t \rightarrow \infty$, así se obtiene

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}} \int_0^\infty \exp \left[\left(\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0\check{\mathcal{Q}} \right) \tau \right] d\tau \check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle.$$

Finalmente, la ecuación para la evolución temporal será

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = (\check{\mathcal{L}}_0 - \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0^+\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}})\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle.$$

C.8. Inverso de Drazin

Dado la matriz $\check{\mathcal{L}}_0$, el inverso de Drazin es un tipo de inverso generalizado que consiste en la única matriz que cumple

$$\begin{aligned}\check{\mathcal{L}}_0 \check{\mathcal{L}}_0^+ \check{\mathcal{L}}_0 &= \check{\mathcal{L}}_0 \\ \check{\mathcal{L}}_0^+ \check{\mathcal{L}}_0 \check{\mathcal{L}}_0^+ &= \check{\mathcal{L}}_0^+ \\ \check{\mathcal{L}}_0^+ \check{\mathcal{L}}_0 &= \check{\mathcal{L}}_0 \check{\mathcal{L}}_0^+.\end{aligned}$$

Si se considera la ecuación 4.3, se puede probar que

$$\check{\mathcal{L}}_0 \check{\mathcal{L}}_0^+ = - \int_0^\infty d\tau \check{\mathcal{L}}_0 \exp[\check{\mathcal{L}}_0 \tau] \check{Q} = - \int_0^\infty d\tau \exp[\check{\mathcal{L}}_0 \tau] \check{\mathcal{L}}_0 \check{Q} = - \int_0^\infty d\tau \exp[\check{\mathcal{L}}_0 \tau] \check{Q} \check{\mathcal{L}}_0 = \check{\mathcal{L}}_0^+ \check{\mathcal{L}}_0,$$

de manera análoga, se pueden probar las otras 2 ecuaciones.

Finalmente, para poder utilizar el inverso de Drazin en la ecuación, este puede calcularse numéricamente mediante una descomposición espectral. En particular, se utilizan los autovalores y autovectores generalizados del superoperador, tanto por la izquierda como por la derecha

$$\check{\mathcal{L}}_0 |x_j\rangle\rangle = \lambda_j |x_j\rangle\rangle \quad \langle\langle y_j | \check{\mathcal{L}}_0 = \langle\langle y_j | \lambda_j,$$

donde $\langle\langle y_i | x_j \rangle\rangle = \delta_{ij}$.

Si se toma λ_0 como el único autovalor cero del operador $\check{\mathcal{L}}_0$, se podrá escribir la descomposición espectral como

$$\check{\mathcal{L}}_0 = \sum_{j \neq 0} \lambda_j |x_j\rangle\rangle \langle\langle y_j|.$$

Finalmente, el inverso de Drazin estará definido por

$$\check{\mathcal{L}}_0^+ = \sum_{j \neq 0} \frac{1}{\lambda_j} |x_j\rangle\rangle \langle\langle y_j|.$$

C.9. Expresión para los flujos de información

Para poder calcular los flujos de información, primero se debe ser capaz de determinar $\ln \hat{\rho}_S$. Se parte de la matriz densidad descrita en la ecuación C.13, la cual se encuentra diagonalizada, excepto por ciertos bloques no diagonales que deben ser tratados por separado, los cuales son

$$\begin{bmatrix} \rho_{100} & \alpha \\ \alpha^* & \rho_{010} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \rho_{101} & \beta \\ \beta^* & \rho_{011} \end{bmatrix}.$$

Con autovalores dados por

$$\lambda_{0\pm} = \frac{\rho_{100} + \rho_{010}}{2} \pm \frac{([\rho_{100} - \rho_{010}]^2 + 4|\alpha|^2)^{1/2}}{2} \quad \lambda_{1\pm} = \frac{\rho_{101} + \rho_{011}}{2} \pm \frac{([\rho_{101} - \rho_{011}]^2 + 4|\beta|^2)^{1/2}}{2},$$

si se considera $\alpha = |\alpha|e^{i\phi_0}$ y $\beta = |\beta|e^{i\phi_1}$, se podrán escribir los autovectores como

$$\begin{aligned} v_{0+} &= [0, 0, \cos(\theta_0/2)e^{i\phi_0/2}, \sin(\theta_0/2)e^{-i\phi_0/2}, 0, 0, 0, 0]^T \\ v_{0-} &= [0, 0, -\sin(\theta_0/2)e^{i\phi_0/2}, \cos(\theta_0/2)e^{-i\phi_0/2}, 0, 0, 0, 0]^T \\ v_{1+} &= [0, 0, 0, 0, \cos(\theta_1/2)e^{i\phi_1/2}, \sin(\theta_1/2)e^{-i\phi_1/2}, 0, 0]^T \\ v_{1-} &= [0, 0, 0, 0, -\sin(\theta_1/2)e^{i\phi_1/2}, \cos(\theta_1/2)e^{-i\phi_1/2}, 0, 0]^T, \end{aligned}$$

con $\sin(\theta_0) = |\alpha|/\sqrt{\Delta_0^2 + |\alpha|^2}$, $\sin(\theta_1) = |\beta|/\sqrt{\Delta_1^2 + |\beta|^2}$ y

$$\Delta_i = \frac{(\rho_{10i} - \rho_{01i})}{2},$$

mediante esta expresión, se podrá obtener el logaritmo natural de la matriz

$$\ln \hat{\rho}_S = \hat{V} \ln \hat{\rho}_D \hat{V}^{-1}.$$

Donde $\ln \hat{\rho}_D$ es la matriz diagonal

$$\ln \hat{\rho}_D = \begin{bmatrix} \ln \rho_{000} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ln \lambda_{0+} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ln \lambda_{0-} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ln \rho_{001} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ln \rho_{110} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ln \lambda_{1+} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ln \lambda_{1-} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ln \rho_{111} \end{bmatrix},$$

y

$$\hat{V} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta_0/2)e^{i\phi_0/2} & -\sin(\theta_0/2)e^{i\phi_0/2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sin(\theta_0/2)e^{-i\phi_0/2} & \cos(\theta_0/2)e^{-i\phi_0/2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cos(\theta_1/2)e^{i\phi_1/2} & -\sin(\theta_1/2)e^{i\phi_1/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sin(\theta_1/2)e^{-i\phi_1/2} & \cos(\theta_1/2)e^{-i\phi_1/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Finalmente, se obtiene

$$\ln \hat{\rho}_S = \begin{bmatrix} \ln \rho_{000} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_0 & c_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_0^* & b_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ln \rho_{001} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ln \rho_{110} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_1 & c_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_1^* & b_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ln \rho_{111} \end{bmatrix},$$

con las cantidades

$$\begin{aligned} a_i &= \cos^2(\theta_i/2) \ln \lambda_{i+} + \sin^2(\theta_i/2) \ln \lambda_{i-} \\ b_i &= \sin^2(\theta_i/2) \ln \lambda_{i+} + \cos^2(\theta_i/2) \ln \lambda_{i-} \\ c_i &= \frac{\sin(\theta_i)}{2} e^{i\phi_i} (\ln \lambda_{i+} - \ln \lambda_{i-}). \end{aligned}$$

Así, el logaritmo de la matriz densidad es

$$\begin{aligned} \ln \hat{\rho}_S &= \ln \rho_{111} |111\rangle \langle 111| + \ln \rho_{110} |110\rangle \langle 110| + \ln \rho_{001} |001\rangle \langle 001| \\ &+ \ln \rho_{000} |000\rangle \langle 000| + a_0 |100\rangle \langle 100| + b_0 |010\rangle \langle 010| \\ &+ a_1 |101\rangle \langle 101| + b_1 |011\rangle \langle 011| + c_0 |100\rangle \langle 010| \\ &+ c_0^* |010\rangle \langle 100| + c_1 |101\rangle \langle 011| + c_1^* |011\rangle \langle 101|. \end{aligned}$$

Por otro lado, los disipadores que actúan en los operadores de Lindblad \mathcal{L}_L y \mathcal{L}_R se pueden expresar mediante los operadores

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}[\hat{d}_L^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_R)\hat{\rho}_S] &= \rho_{000}|100\rangle\langle 100| - \rho_{000}|000\rangle\langle 000| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_R^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_L)\hat{\rho}_S] &= \rho_{000}|010\rangle\langle 010| - \rho_{000}|000\rangle\langle 000| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_R)\hat{\rho}_S] &= \rho_{100}|000\rangle\langle 000| - \rho_{100}|100\rangle\langle 100| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_L)\hat{\rho}_S] &= \rho_{010}|000\rangle\langle 000| - \rho_{010}|010\rangle\langle 010| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_L^\dagger\hat{n}_D\hat{n}_R\hat{\rho}_S] &= \rho_{011}|111\rangle\langle 111| - \rho_{011}|011\rangle\langle 011| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_R^\dagger\hat{n}_D\hat{n}_L\hat{\rho}_S] &= \rho_{101}|111\rangle\langle 111| - \rho_{101}|101\rangle\langle 101| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_L\hat{n}_D\hat{n}_R\hat{\rho}_S] &= \rho_{111}|011\rangle\langle 011| - \rho_{111}|111\rangle\langle 111| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_R\hat{n}_D\hat{n}_L\hat{\rho}_S] &= \rho_{111}|101\rangle\langle 101| - \rho_{111}|111\rangle\langle 111| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_L^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_R\hat{\rho}_S] &= \rho_{010}|110\rangle\langle 110| - \rho_{010}|010\rangle\langle 010| - \frac{1}{2}(\alpha|100\rangle\langle 010| + \alpha^*|010\rangle\langle 100|) \\
\mathcal{D}[\hat{d}_R^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_L\hat{\rho}_S] &= \rho_{100}|110\rangle\langle 110| - \rho_{100}|100\rangle\langle 100| - \frac{1}{2}(\alpha|100\rangle\langle 010| + \alpha^*|010\rangle\langle 100|) \\
\mathcal{D}[\hat{d}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_R\hat{\rho}_S] &= \rho_{110}|010\rangle\langle 010| - \rho_{110}|110\rangle\langle 110| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_L\hat{\rho}_S] &= \rho_{110}|100\rangle\langle 100| - \rho_{110}|110\rangle\langle 110| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_L^\dagger\hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_R)\hat{\rho}_S] &= \rho_{001}|101\rangle\langle 101| - \rho_{001}|001\rangle\langle 001| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_R^\dagger\hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_L)\hat{\rho}_S] &= \rho_{001}|011\rangle\langle 011| - \rho_{001}|001\rangle\langle 001| \\
\mathcal{D}[\hat{d}_L\hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_R)\hat{\rho}_S] &= \rho_{101}|001\rangle\langle 001| - \rho_{101}|101\rangle\langle 101| - \frac{1}{2}(\beta|101\rangle\langle 011| + \beta^*|011\rangle\langle 101|) \\
\mathcal{D}[\hat{d}_R\hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_L)\hat{\rho}_S] &= \rho_{011}|001\rangle\langle 001| - \rho_{011}|011\rangle\langle 011| - \frac{1}{2}(\beta^*|011\rangle\langle 101| + \beta|101\rangle\langle 011|).
\end{aligned}$$

Con estas cantidades, se podrán obtener los flujos de información en el estado estacionario mediante la expresión $\dot{I}_i = \text{Tr}[(\mathcal{L}_i\hat{\rho}_S \ln \hat{\rho}_S)]$. De este modo, se obtiene

$$\begin{aligned}
\dot{I}_L &= \kappa_L(f_L(\epsilon)[a_0\rho_{000} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_L(\epsilon))[\rho_{100} \ln \rho_{000} - a_0\rho_{100}]) \\
&+ \kappa_L^U(f_L(\epsilon + U)[a_1\rho_{001} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_L(\epsilon + U))[\rho_{101} \ln \rho_{001} - a_1\rho_{101} - \text{Re}(b_1^*\beta)]) \\
&+ \kappa_L(f_L(\epsilon + U_f)[\rho_{010} \ln \rho_{110} - b_0\rho_{010} - \text{Re}(\alpha c_0^*)] + (1 - f_L(\epsilon + U_f))[b_0\rho_{110} - \rho_{110} \ln \rho_{110}]) \\
&+ \kappa_L(f_L(\epsilon + U + U_f)[\rho_{011} \ln \rho_{111} - b_1\rho_{011}] + (1 - f_L(\epsilon + U + U_f))[b_1\rho_{111} - \rho_{111} \ln \rho_{111}])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{I}_R &= \kappa_R(f_R(\epsilon)[b_0\rho_{000} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_R(\epsilon))[\rho_{010} \ln \rho_{000} - b_0\rho_{010}]) \\
&+ \kappa_R^U(f_R(\epsilon + U)[b_1\rho_{001} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_R(\epsilon + U))[\rho_{011} \ln \rho_{001} - a_1\rho_{011} - \text{Re}(b_1^*\beta)]) \\
&+ \kappa_R(f_R(\epsilon + U_f)[\rho_{100} \ln \rho_{110} - a_0\rho_{100} - \text{Re}(\alpha c_0^*)] + (1 - f_R(\epsilon + U_f))[a_0\rho_{110} - \rho_{110} \ln \rho_{110}]) \\
&+ \kappa_R(f_R(\epsilon + U + U_f)[\rho_{101} \ln \rho_{111} - a_1\rho_{101}] + (1 - f_R(\epsilon + U + U_f))[a_1\rho_{111} - \rho_{111} \ln \rho_{111}]).
\end{aligned}$$

Si bien el cálculo de los flujos de información puede realizarse numéricamente, la obtención de expresiones analíticas permite identificar claramente la contribución de las coherencias cuánticas a dichos flujos, manifestada tanto en los parámetros a_i , b_i como en los términos $\text{Re}(\alpha c_0^*)$ y $\text{Re}(b_1^*\beta)$. Es importante destacar que en el límite en que las coherencias se anulan,

se recupera el resultado correspondiente a un sistema clásico

$$\begin{aligned}
\lim_{\alpha, \beta \rightarrow 0} \dot{I}_L = \dot{I}_{Lclassic} = & \kappa_L(f_L(\epsilon))[\rho_{000} \ln \rho_{100} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_L(\epsilon))[\rho_{100} \ln \rho_{000} - \rho_{100} \ln \rho_{100}] \\
& + \kappa_L^U(f_L(\epsilon + U))[\rho_{001} \ln \rho_{101} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_L(\epsilon + U))[\rho_{101} \ln \rho_{001} - \rho_{101} \ln \rho_{101}] \\
& + \kappa_L(f_L(\epsilon + U_f))[\rho_{010} \ln \rho_{110} - \rho_{010} \ln \rho_{010}] + (1 - f_L(\epsilon + U_f))[\rho_{110} \ln \rho_{010} - \rho_{110} \ln \rho_{110}] \\
& + \kappa_L(f_L(\epsilon + U + U_f))[\rho_{011} \ln \rho_{111} - \rho_{011} \ln \rho_{011}] \\
& + \kappa_L((1 - f_L(\epsilon + U + U_f))[\rho_{111} \ln \rho_{011} - \rho_{111} \ln \rho_{111}])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{\alpha, \beta \rightarrow 0} \dot{I}_R = \dot{I}_{Rclassic} = & \kappa_R(f_R(\epsilon))[\rho_{000} \ln \rho_{010} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_R(\epsilon))[\rho_{010} \ln \rho_{000} - \rho_{010} \ln \rho_{010}] \\
& + \kappa_R^U(f_R(\epsilon + U))[\rho_{001} \ln \rho_{011} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_R(\epsilon + U))[\rho_{011} \ln \rho_{001} - \rho_{011} \ln \rho_{011}] \\
& + \kappa_R(f_R(\epsilon + U_f))[\rho_{100} \ln \rho_{110} - \rho_{100} \ln \rho_{100}] + (1 - f_R(\epsilon + U_f))[\rho_{110} \ln \rho_{100} - \rho_{110} \ln \rho_{110}] \\
& + \kappa_R(f_R(\epsilon + U + U_f))[\rho_{101} \ln \rho_{111} - \rho_{101} \ln \rho_{101}] \\
& + \kappa_R((1 - f_R(\epsilon + U + U_f))[\rho_{111} \ln \rho_{101} - \rho_{111} \ln \rho_{111}]).
\end{aligned}$$