



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

ESTUDIO DE LA TERMODINÁMICA DE 3 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:

PROFESOR 2

PROFESOR 3

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por:

NOMBRE INSTITUCIÓN

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

ESTUDIO DE LA TERMODINÁMICA DE 3 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 emplea una descripción 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 del sistema 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.

*Una frase de dedicatoria,
pueden ser dos líneas.*

Saludos

Agradecimientos

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

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	4
2. Estadística de conteo(<i>Full Counting Statistics</i>)	9
2.1. Cantidades termodinámicas	9
2.2. Leyes de la termodinámica	10
2.2.1. Ley cero	10
2.2.2. Primera Ley	10
2.2.3. Segunda Ley	10
2.3. Estadística de medición en dos puntos	11
2.4. Formalismo de Superoperadores y Espacio de Liouville	13
2.5. Ecuación maestra generalizada	15
2.5.1. Resolución finita de energía	16
2.5.2. Agrupación de frecuencias	17
2.6. Consistencia termodinámica	19
2.6.1. Ley cero	20
2.6.2. Segunda ley	20
3. Flujos de información	22
3.1. Demonio de Maxwell	22
3.2. Demonio de Maxwell autónomo	23
3.3. Descripción clásica	24
3.4. Segunda ley de la termodinámica y flujos de información	25
3.5. Descripción cuántica	28
3.6. Flujos de información en contexto cuántico	30
4. Dinámica de un sistema de 3 puntos cuánticos conectado al ambiente	33
4.1. Modelo teórico	33
4.2. Estudio del transporte	37
4.3. Demonio de Maxwell en 3 puntos cuánticos	41
4.4. Comparación con caso clásico	51

Conclusiones	55
Bibliografía	56
Anexos	60
A. Cálculos realizados sección 2	60
A.1. Matriz de densidad en función del campo de conteo	60
A.2. Matriz de densidad generalizada	61
A.3. Funciones correlación	64
A.4. Ecuación de Lindblad generalizada	66
A.5. Condición KMS y funciones correlación espectral	67
A.6. Ley cero	68
A.7. Segunda Ley	69
B. Cálculos realizados sección 3	70
B.1. Producción de entropía y información	70
C. Cálculos realizados seccion 4	72
C.1. Funciones de correlación para un baño de fermiones libres	72
C.2. Operadores de salto de sistema de 3 puntos cuánticos	73
C.3. Agrupación de frecuencias para 2 puntos cuánticos	75
C.4. Límitaciones de la aproximación semilocal	78
C.5. Aspecto Markoviano de las funciones correlación	78
C.6. Cálculo numérico para los tiempos de correlación	82
C.7. Concurrencia	86
C.8. Modelo clásico	87
C.9. Inverso de Drazin	90
C.10. Expresión para los flujos de información	90

Índice de Ilustraciones

3.1.	Esquema que representa al Demonio de Maxwell. Primero, consiste en los dos compartimientos que poseen el gas ideal distribuido de manera homogénea. Por último, al trasladar las partículas de un lado a otro, queda el compartimiento A con partículas frías mientras que el compartimiento B con partículas calientes. Esta figura fue tomada de [38]	23
4.1.	Esquema que representa el sistema reducido compuesto por tres puntos cuánticos, modelados como tres niveles de energía. Estos niveles presentan interacción de Coulomb repulsiva entre ellos, y cada uno está acoplado a un baño térmico distinto.	34
4.2.	Corriente de partículas en función de la razón eV/T . Las temperaturas de los reservorios son $T_L = T_R = 100$ y $T_d = 2$. El parámetro de acoplamiento se fija en $g = \frac{5}{1000}$. Las energías de sitio corresponden a $\epsilon = 0$ y $\epsilon_d = \mu_d - \frac{U}{2}$, mientras que las interacciones de Coulomb se fijan en $U_F = 500$ y $U = 40$	37
4.3.	Potencia entregada por los reservorios en función de eV/T	38
4.4.	Flujo de calor recibido por los sistemas LR y D en función de eV/T	38
4.5.	Flujo de energía entregado por los reservorios en función de eV/T	39
4.6.	Coherencia(línea azul) y concurrencia(línea roja) en función de eV/T	40
4.7.	Primer paso en la dinámica, el sitio D y el sitio R poseen una mayor probabilidad de estar ocupados.	41
4.8.	Segundo paso en la dinámica, el hopping g genera superposición entre los sitios L y R	42
4.9.	Tercer paso en la dinámica, el electrón se transporta al baño L	42
4.10.	Elementos diagonales de la matriz densidad en función de eV/T	43
4.11.	(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 $\mu_d = 2$, razones de túnel $\gamma_L = \gamma_R^U = 1/100$, $\gamma_R = \gamma_L^U = 1/600$, $\gamma_D = \gamma_D^U = 1/50$, acoplamiento entre los sitios $g = 5/1000$ e interacciones de Coulomb $U = 40$ y $U_F = 500$	44
4.12.	Tasa de producción de entropía aparente del sistema $LR(\dot{\sigma}_{LR}^o)$ en función de eV/T	45
4.13.	Tasa de producción de entropía del sistema $LR(\dot{\sigma}_{LR})$ en función de eV/T	45
4.14.	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.	46
4.15.	Flujos de información de cada sitio, L, R y D	47
4.16.	En línea azul la norma- l_1 de la coherencia \mathcal{C}_{l_1} y en línea rojas la concurrencia \mathcal{C}_{on}	48

4.17.	Cantidades termodinámicas para el sistema LR y el Demonio en función de g/γ_L , considerando $eV/T = 1$ y el resto de parámetros corresponden a los de la Figura 4.11.	49
4.18.	(a)Flujos de información de cada sitio. (b)Concurrencia y coherencia en función de g/γ_L	50
4.19.	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.	52
4.20.	Elementos diagonales ρ_{101} , ρ_{000} , ρ_{011} y ρ_{001} en función de eV/T	52
4.21.	Corriente de partículas y flujos de información para el caso clásico(rojo) y cuántico(azul) en función de eV/T	54
C.1.	Tasas de túnel en función de las frecuencias ω	79
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.	82
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.	83
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.	83
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.	84
C.6.	Componentes ρ_{100} y ρ_{010} de la matriz densidad en función del tiempo, para distintos valores de eV/T	85

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, se pierde la posibilidad

de distinguir entre flujos locales de información. 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].

Para resolver este dilema, Potts et al. propusieron una ecuación maestra termodinámicamente consistente que permite trabajar en la base local e incluir términos no seculares[22]. Su enfoque reconoce que una descripción markoviana implica una resolución energética finita, y por tanto introduce un Hamiltoniano rescalado en la definición de las cantidades termodinámicas.

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, y cómo estos efectos influyen en el flujo 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 el presente trabajo se emplea el formalismo de Potts para describir la evolución temporal de un sistema cuántico formado por tres puntos cuánticos, cada uno acoplado a un reservorio distinto. Uno de estos puntos cuánticos desempeña el rol de Demonio de Maxwell, mientras que los otros dos constituyen el sistema físico, denotado como LR . Esta configuración permite estudiar los flujos de información y las demás magnitudes termodinámicas relevantes, en un régimen donde se manifiestan efectos cuánticos tales como la coherencia y el entrelazamiento entre los distintos sitios del sistema.

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 presenta la dinámica de un sistema compuesto por tres puntos cuánticos, y se analizan los principales resultados obtenidos para dos configuraciones distintas del modelo.

Capítulo 1

Sistemas cuánticos abiertos

En este capítulo se describen los conceptos básicos para poder describir la evolución de un sistema cuántico, en la sección 1.1.1 se describe la evolución unitaria para un sistema cerrado. Por otro lado en la sección 1.2.2 se describe una de las ecuaciones utilizadas para describir el comportamiento de un sistema cuántico acoplado a un reservorio con infinitos grados de libertad.

1.1. Sistemas cuánticos cerrados

Un sistema cuántico cerrado puede ser descrito por la matriz densidad $\hat{\rho}$, la evolución de la matriz densidad dependerá del Hamiltoniano del sistema $\hat{H}(t)$, la cuál en el cuadro de Schrodinger consiste en la ecuación de Liouville-Von Neumann($\hbar = 1$)[17]:

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

Y la solución descrita por la evolución unitaria

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

en donde \hat{T}_{\leftarrow} consiste en el operador ordenación temporal cronológico que ordena los productos de operadores dependientes del tiempo, de tal manera que el tiempo en el que son evaluados los operadores va creciendo de derecha a izquierda.

1.1.1. Cuadro de interacción

Supongamos que el Hamiltoniano del sistema se puede separar en dos partes

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

en teoría esto se puede hacer de varias formas, pero por lo general, si tenemos el caso de dos subsistemas, \hat{H}_0 contiene los Hamiltonianos de cada uno de ellos cuando no hay interacción, mientras que \hat{H}_I representa la interacción entre ellos. Si introducimos los operadores unitarios

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

se puede describir la matriz densidad en el cuadro de interacción

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

Y la evolución en este cuadro de interacción es

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

con

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

1.2. Ecuación de Lindblad

1.2.1. Dinámica de un sistema abierto

Un sistema abierto consiste en un sistema cuántico S denominado el sistema reducido, el cual está acoplado a un sistema B denominado el ambiente. Estos representan 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, el espacio de Hilbert del sistema total $S + B$ es $\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_B$, el Hamiltoniano total se constituye por el Hamiltoniano del sistema \hat{H}_S , el Hamiltoniano \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 describir el sistema con la ecuación 1.2 es necesario separarlo en dos subsistemas, S y B , permitiendo así que el espacio de Hilbert total sea descrito por $\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_B$. Sin embargo, en el caso de partículas idénticas como los fermiones el identificar estos dos subsistemas no es obvio. Aún así, en el formalismo de segunda cuantización el sistema se puede describir mediante una base del espacio de Fock, que sí permite encontrar subsistemas en los cuáles el espacio de Hilbert total es un producto tensorial antisimétrico entre los dos subsistemas[24, 25].

Los observables que se estudian en el sistema S son de la forma $A \otimes \mathbf{I}_B$ y su valor de expectación puede ser calculado mediante la ecuación

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

donde

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

es la matriz densidad del sistema reducido. La expresión Tr_S hace referencia a la traza con respecto al espacio de Hilbert del sistema, mientras que Tr_B es la traza con respecto al espacio de Hilbert del ambiente. El objeto de estudio principalmente es $\hat{\rho}_S$ y la ecuación de Lindblad será utilizada para describir su evolución.

1.2.2. Ecuación maestra

Partiendo de un sistema S acoplado débilmente a un reservorio B , donde el Hamiltoniano total es descrito por

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

la evolución en el cuadro de interacción del sistema total será

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

o en su forma integral

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

Reinsertando la forma integral en la ecuación 1.3 y trazando los grados de libertad del reservorio, nos queda

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

Ahora se asumirán dos cosas, primero sin pérdida de generalidad se asumirá $\text{Tr}_B\{[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}(0)]\} = 0$ [17]. Segundo, debido a que todavía la ecuación depende de $\hat{\rho}(t)$ correspondiente al sistema total, tendremos que realizar la aproximación de Born, que consiste en que si se tiene acoplamiento débil, la influencia del sistema en el reservorio será pequeña, por ende se puede asumir que el estado del reservorio $\hat{\rho}_B$ permanece constante, y sólo el que se ve alterado es la evolución del sistema, es decir

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_S(t) \otimes \hat{\rho}_B,$$

con lo cuál la ecuación 1.3 se vuelve

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

Esta ecuación es lo que se denomina no Markoviana, ya que requiere conocer todo el pasado de $\hat{\rho}_{IS}(s)$. Para simplificar el problema, se aplicará la aproximación de Markov, con el objetivo de que la evolución de $\hat{\rho}_{IS}(t)$ dependa sólo del estado en que se encuentra en el instante de tiempo, es decir

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

esta ecuación es denominada la ecuación de Redfield. Se puede hacer el cambio de variable $s = t - s$, así el integral queda

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

Por último, se podrá hacer otra aproximación, ya que en esta expresión aparecen las funciones correlación del baño, las cuáles decaen en el tiempo con una escala característica dada por el denominado tiempo de correlación τ_B , a partir del cual dichas funciones se vuelven despreciables. Mientras que el sistema tendrá su tiempo de relajación τ_R que consiste en el tiempo que demora en llegar a su estado estacionario. La aproximación markoviana requiere que $\tau_R \gg \tau_B$, ya que él sistema no debe ser capaz de percibir la dinámica del baño, esto permite tomar el límite del integral en 1.6 a infinito, ya que para tiempos muy largos se

anula el integral debido a que las funciones correlación se vuelven practicamente nulas. Y finalmente quedará la evolución

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

La interacción en el cuadro de Schrodinger \hat{H}_I será de la forma general

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

donde los operadores $A_{\alpha} = A_{\alpha}^{\dagger}$ actuan en el espacio de Hilbert del sistema, mientras que $B_{\alpha} = B_{\alpha}^{\dagger}$ actua en el espacio de Hilbert del reservorio. Es conveniente escribir la interacción en función de los autoestados de \hat{H}_S . Para ello, si tenemos los autovalores ϵ y sus respectivos operadores de proyección $\Pi(\epsilon) = |\epsilon\rangle\langle\epsilon|$, se podrán definir los operadores

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

estos operadores se denominan operadores globales, ya que la suma esta descrita por los autoestados del sistema que cumplen $\epsilon' - \epsilon = \omega$.

De la relación de completitud $\sum_{\epsilon} \Pi(\epsilon) = \mathbf{I}$ podremos notar que

$$\begin{aligned} \sum_{\omega} A_{\alpha}(\omega) &= \sum_{\omega, \epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \Pi(\epsilon') \\ &= \sum_{\omega, \epsilon} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \Pi(\epsilon + \omega) \\ &= A_{\alpha} = \sum_{\omega} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega), \end{aligned}$$

con esto el Hamiltoniano de interacción en el cuadro de Schrodinger

$$\hat{H}_I = \sum_{\alpha, \omega} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha} = \sum_{\alpha, \omega} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \otimes B_{\alpha}^{\dagger}.$$

Debido a 1.8, el operador $A_{\alpha}(\omega)$ cumple las relaciones

$$\begin{aligned} [\hat{H}_S, A_{\alpha}(\omega)] &= -\omega A_{\alpha}(\omega) \\ [\hat{H}_S, A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)] &= \omega A_{\alpha}^{\dagger}(\omega), \end{aligned}$$

posteriormente se deberá pasar al cuadro de interacción y calcular $U_s^{\dagger}(t) \hat{H}_I U_s(t)$. Para ello, se utilizará la relación de Baker Campbell

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

y se puede derivar las relaciones

$$e^{i\hat{H}st}A_\alpha(\omega)e^{-i\hat{H}st} = e^{-i\omega t}A_\alpha(\omega)$$

$$e^{i\hat{H}st}A_\alpha^\dagger(\omega)e^{-i\hat{H}st} = e^{i\omega t}A_\alpha^\dagger(\omega).$$

Con estas relaciones, $\hat{H}_I(t)$ 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 $B_\alpha(t) = e^{i\hat{H}_B t} B_\alpha e^{-i\hat{H}_B t}$. La ecuación 1.10 se puede introducir en la ecuación 1.7 y se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = \int_0^\infty ds \text{Tr}_B \Big[& \hat{H}_I(t-s)\hat{\rho}_{IS}(t)\hat{\rho}_B\hat{H}_I(t) - \hat{\rho}_{IS}(t)\hat{\rho}_B\hat{H}_I(t-s)\hat{H}_I(t) \\ & + \hat{H}_I(t)\hat{\rho}_{IS}(t)\hat{\rho}_B\hat{H}_I(t-s) - \hat{H}_I(t)\hat{H}_I(t-s)\hat{\rho}_{IS}(t)\hat{\rho}_B \Big], \end{aligned}$$

así, reemplazando la forma explícita de la interacción

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}_{IS}(t) = \sum_{\omega,\omega'} \sum_{\alpha,\beta} \int_0^\infty ds \text{Tr}_B [& e^{i\omega s} B_\beta(t-s)\hat{\rho}_B B_\alpha^\dagger(t)] e^{i(\omega'-\omega)t} \left(A_\beta(\omega)\hat{\rho}_{IS}(t)A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega')A_\beta(\omega)\hat{\rho}_{IS}(t) \right) \\ & + \sum_{\omega,\omega'} \sum_{\alpha,\beta} \int_0^\infty ds \text{Tr}_B [e^{-i\omega s} B_\alpha(t)\hat{\rho}_B B_\beta^\dagger(t-s)] e^{-i(\omega'-\omega)t} \left(A_\alpha(\omega')\hat{\rho}_{IS}(t)A_\beta^\dagger(\omega) - \hat{\rho}_{IS}(t)A_\beta^\dagger(\omega)A_\alpha(\omega') \right). \end{aligned}$$

Se pueden definir las funciones correlación espectral del baño por

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

y aplicando estas funciones queda

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

Si se considera el tiempo característico de evolución del sistema S como $\tau_S = |\omega - \omega'|^{-1}$, y además se cumple que el tiempo de relajación $\tau_R \gg \tau_S$, entonces los términos no seculares (aquellos con $\omega \neq \omega'$) pueden despreciarse. Esto se debe a que los factores oscilatorios $e^{i(\omega-\omega')t}$ varían rápidamente en la escala de tiempo τ_R , promediándose a cero. Esta aproximación, se denomina secular [17], y tiene repercusiones en la dinámica del sistema, ya que al suprimir los términos no seculares, se pierde la información de las partes no diagonales de la matriz densidad. Posteriormente, en la sección 2.5 se discutirá una ecuación maestra que preserve estos efectos.

Al realizar la aproximación secular, la evolución del sistema queda

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

finalmente, al separar la función correlación espectral en su parte real e imaginaria como

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \gamma_{\alpha\beta}(\omega)/2 + iS_{\alpha\beta}(\omega).$$

Se obtiene la ecuación de Lindblad

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

con \hat{H}_{LS} el Hamiltoniano *Lamb Shift*

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

y el Disipador

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

El escribir el disipador de esta manera es importante, ya que esta evolución se encuentra en la forma GKLS que permite preservar traza, hermiticidad y positividad de la matriz densidad[26]. Finalmente, en el cuadro de Schrodinger la ecuación de Lindblad queda

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

Capítulo 2

Estadística de conteo(*Full Counting Statistics*)

En este capítulo se presenta el formalismo de *Full Counting Statistics*(FCS). La sección 2.1 esta dedicada a la descripción de las cantidades termodinámicas de interés, y en la sección 2.2 se establecen las leyes de la termodinámica. En la sección 2.3 se desarrolla la estadística de medición en 2 puntos, mientras que en la sección 2.4 se describe brevemente el formalismo de superoperadores. En la sección 2.5 se desarrolla el cálculo de la ecuación maestra generalizada deducida en [22]. Finalmente, en la sección 2.6 se analiza la consistencia termodinámica, tanto para la ecuación maestra global, como para la ecuación maestra local presentada en este capítulo.

2.1. Cantidades termodinámicas

Se considera el sistema descrito por el Hamiltoniano

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

donde el primer término describe el Hamiltoniano del sistema el cual puede ser tiempo dependiente, la segunda parte describe los reservorios térmicos y por último la tercera parte constituye el acoplamiento entre sistema-baño.

El sistema intercambia energía y partículas con el reservorio, por ende el cambio de energía puede ser dividido por una contribución correspondiente al calor y otra correspondiente al trabajo. Así, se define el calor que libera el baño α durante el intervalo de tiempo $[0, t]$ como

$$\langle Q_{\alpha} \rangle = -\text{Tr}\{(\hat{H}_{\alpha} - \mu_{\alpha}\hat{N}_{\alpha})\hat{\rho}_{tot}(t)\} + \text{Tr}\{(\hat{H}_{\alpha} - \mu_{\alpha}\hat{N}_{\alpha})\hat{\rho}_{tot}(0)\}, \quad (2.1)$$

en la cual \hat{N}_{α} corresponde al operador de número que cuantifica el número de partículas en el baño α y μ_{α} es su potencial químico. El trabajo promedio que entrega el reservorio α se define como

$$\langle W_{\alpha} \rangle = -\mu_{\alpha}(\text{Tr}\{\hat{N}_{\alpha}\hat{\rho}_{tot}(t)\} - \text{Tr}\{\hat{N}_{\alpha}\hat{\rho}_{tot}(0)\}). \quad (2.2)$$

2.2. Leyes de la termodinámica

2.2.1. Ley cero

Si se tiene un sistema total descrito por un sistema reducido y un baño, que se encuentran en equilibrio a temperatura inversa β y potencial químico μ . De tal manera que el estado del sistema en equilibrio es el equilibrio gran canónico

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

y por lo tanto el estado de equilibrio del sistema reducido es

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

que en el límite de acoplamiento débil entre el sistema y el baño, este equilibrio se convierte en [27]

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

2.2.2. Primera Ley

Para escribir la primera ley, primero se puede definir la corriente de calor y la potencia entregadas por el baño α

$$J_\alpha(t) = \partial_t \langle Q_\alpha \rangle \quad P_\alpha(t) = \partial_t \langle W_\alpha \rangle.$$

Así, en el límite de acoplamiento débil para un Hamiltoniano tiempo independiente, la primera ley consiste en

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

donde $E(t)$ es la energía interna del sistema.

2.2.3. Segunda Ley

Para introducir la segunda ley, se parte de la condición inicial en que el sistema y el reservorio son sistemas no correlacionados, es decir

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

donde cada reservorio se encuentra en equilibrio gran canónico con inverso de la temperatura β_α y potencial químico μ_α . Con esta condición inicial, la segunda ley puede ser escrita en función de la producción de entropía $\sigma(t)$ como [28]

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

ΔS denota el cambio en la entropía de Von Neumann del sistema

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

es decir, la producción de entropía se separa en una parte que corresponde al cambio de entropía del sistema, mientras que la segunda parte corresponde a la contribución debido al calor que entrega el ambiente.

Como en este trabajo se hará análisis de flujos continuos tanto de energía como de partículas, es importante estudiar la tasa de producción de entropía. Si bien, la producción de entropía siempre es positiva, la tasa de producción de entropía no siempre lo es, aún así para sistemas markovianos se cumple que [29]

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

Y la igualdad se cumple para procesos reversibles. Con esto se han definido las leyes de la termodinámica en función de flujos continuos, que se podrán calcular a través de la matriz densidad reducida. En esta tesis estas cantidades serán estudiadas principalmente en el estado estacionario.

2.3. Estadística de medición en dos puntos

A lo largo de este trabajo, se pretende calcular diversas cantidades termodinámicas asociadas a la dinámica del sistema, tales como la energía y el trabajo. Si bien los valores promedio de estas cantidades pueden obtenerse con las expresiones 2.1 y 2.2, tanto el calor y el trabajo intercambiados con los reservorios deben considerarse como variables aleatorias, ya que su determinación implica medir sobre el estado de los reservorios. Debido a la naturaleza cuántica de la evolución, dichas mediciones pueden arrojar distintos resultados en diferentes repeticiones del experimento. Por lo tanto, para acceder a los valores promedio, es útil calcular la distribución de probabilidad del calor y el trabajo intercambiados con el reservorio.

Para un sistema total descrito por la condición inicial $\hat{\rho}_{tot}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes_{\alpha} \hat{\tau}_{\alpha}$ la distribución de probabilidad es

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

La probabilidad conjunta de que cada baño α tenga energía E_{α} , y número de partículas N_{α} a tiempo $t = 0$ es

$$P_0(\mathbf{E}, \mathbf{N}) = \Pi_{\alpha} \frac{e^{-\beta_{\alpha}(E_{\alpha} - \mu_{\alpha} N_{\alpha})}}{\text{Tr}\{e^{-\beta_{\alpha}(E_{\alpha} - \mu_{\alpha} N_{\alpha})}\}}.$$

Para obtener $P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N})$ que corresponde a la probabilidad condicional de que los reservorios tengan energías \mathbf{E}' y números de partículas \mathbf{N}' a tiempo t , dado que inicialmente se midieron los valores \mathbf{E} y \mathbf{N} , se debe partir del estado proyectado a $t = 0$ correspondiente a dicha medición inicial, es decir

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

donde $\hat{P}_{\mathbf{E},\mathbf{N}} = I_S \otimes \hat{P}_{\mathbf{E},\mathbf{N}}^B$ es el proyector asociado a una medición de las energías y los números de partículas en los reservorios. A continuación, el sistema evoluciona de forma unitaria hasta un tiempo t

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

finalmente se realiza una segunda medición a tiempo t , obteniéndose los valores \mathbf{E}' y \mathbf{N}' . De este modo, la probabilidad condicional correspondiente es

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

escribiendo los proyectores de manera explícita $\hat{P}_{\mathbf{E},\mathbf{N}}^B = |\mathbf{E}, \mathbf{N}\rangle\langle\mathbf{E}, \mathbf{N}|$, se puede obtener

$$\begin{aligned} P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N}) &= \text{Tr}\{\hat{U}(t)(\hat{\rho}_S(0) \otimes |\mathbf{E}, \mathbf{N}\rangle\langle\mathbf{E}, \mathbf{N}|)\hat{U}^\dagger(t)|\mathbf{E}', \mathbf{N}'\rangle\langle\mathbf{E}', \mathbf{N}'|\} \\ &= \text{Tr}\{|\mathbf{E}, \mathbf{N}\rangle\langle\mathbf{E}', \mathbf{N}'|\hat{U}(t)\hat{\rho}_S(0)\langle\mathbf{E}, \mathbf{N}|\hat{U}^\dagger(t)|\mathbf{E}', \mathbf{N}'\rangle\} \\ &= \text{Tr}_S\{\text{Tr}_B\{|\mathbf{E}, \mathbf{N}\rangle\langle\mathbf{E}', \mathbf{N}'|\hat{U}(t)\}\hat{\rho}_S(0)\langle\mathbf{E}, \mathbf{N}|\hat{U}^\dagger(t)|\mathbf{E}', \mathbf{N}'\rangle\} \\ &= \text{Tr}_s\{\text{Tr}_B\{|\mathbf{E}, \mathbf{N}\rangle\langle\mathbf{E}', \mathbf{N}'|\hat{U}(t)\}\hat{\rho}_S(0)\text{Tr}_B\{\hat{U}^\dagger(t)|\mathbf{E}', \mathbf{N}'\rangle\langle\mathbf{E}, \mathbf{N}|\}\}. \end{aligned}$$

Por ende, $P_t(\mathbf{E}', \mathbf{N}' | \mathbf{E}, \mathbf{N})$ se puede expresar como

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

Al contar con una distribución de probabilidad, se puede construir la función generadora de momentos, a partir de la cual pueden obtenerse cantidades como el promedio o la varianza. Esta función es

$$\Lambda(\vec{\lambda}, \vec{\chi}) \equiv \int d\mathbf{Q} d\mathbf{W} P(\mathbf{Q}, \mathbf{W}) e^{-i\vec{\lambda} \cdot \mathbf{Q} - i\vec{\chi} \cdot \mathbf{W}}, \quad (2.3)$$

que se puede escribir en función de la evolución de una matriz densidad auxiliar A.1

$$\Lambda(\vec{\lambda}, \vec{\chi}) = \text{Tr}\{\hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t)\} \quad \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t) = \hat{U}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t)\hat{\rho}_{tot}(0)\hat{U}^\dagger(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t), \quad (2.4)$$

y

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

$\vec{\lambda}$ y $\vec{\chi}$ se denominan los parámetros de conteo o *Counting Fields*, y $\hat{\rho}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}; t)$ se denomina la matriz densidad generalizada. Conocer la evolución de esta matriz permite acceder a los momentos del calor, el trabajo y en general, del observable que se quiera estudiar. Sin embargo, dado que esta matriz se describe a partir de la evolución unitaria de la matriz densidad total, el siguiente paso consiste en derivar una ecuación maestra efectiva para los grados de libertad del sistema reducido.

2.4. 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 dimension $N^2 \times 1$. De forma análoga, un superoperador L , que actúa sobre $\hat{\rho}$ en el espacio de Hilbert, se convierte en una matriz \check{L} de dimensión $N^2 \times N^2$ que actúa sobre $|\rho\rangle\rangle$ en el espacio de Liouville. En este espacio se definen las siguientes operaciones

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

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

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

además, se cumple que

$$\langle\langle nn'|mm'\rangle\rangle = \delta_{nm}\delta_{n'm'}$$

$$\langle\langle nn'|A\rangle\rangle = \langle n|\hat{A}|n'\rangle$$

$$\langle\langle 1|A\rangle\rangle = \text{Tr}\{\hat{A}\}.$$

Si la evolución de la matriz densidad $|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle$ esta gobernada por el superoperador $\check{\mathcal{L}}$, entonces la evolución temporal en el espacio de Liouville es

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

la solución formal de esta ecuación consiste en

$$|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = e^{\check{\mathcal{L}}t}|\hat{\rho}(0)\rangle\rangle. \quad (2.5)$$

Además, en este espacio se pueden definir los superoperadores de proyección de Nakajima-Zwanzig, los cuales actúan sobre la matriz densidad total. En este contexto, se define el superoperador $\check{\mathcal{P}}$, que proyecta sobre la parte relevante de la dinámica, mientras que $\check{\mathcal{Q}} = 1 - \check{\mathcal{P}}$ proyecta sobre la parte irrelevante[30]. Estos operadores cumplen con las propiedades

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

Finalmente, la evolución temporal de la matriz densidad a través de estos proyectores es

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

2.5. Ecuación maestra generalizada

Si se considera un Hamiltoniano total $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \epsilon \hat{H}_I = \hat{H}_0 + \epsilon \hat{H}_I$, con ϵ un parámetro adimensional que posteriormente permite aplicar acoplamiento débil. Y se utiliza este Hamiltoniano para la evolución unitaria $\hat{U}(t)$ en la ecuación 2.4, se obtiene la ecuación

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = -i[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)] - i\epsilon[\hat{V}_\lambda \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) - \hat{\rho}_{tot}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{V}_{-\lambda}], \quad (2.6)$$

con el operador \hat{V}_λ descrito por

$$\hat{V}_\lambda = e^{-\frac{i}{2} \hat{A}(\lambda, \chi)} \hat{H}_I e^{\frac{i}{2} \hat{A}(\lambda, \chi)},$$

y $\hat{A}(\lambda, \chi) = -\sum_\alpha [\lambda_\alpha (\hat{H}_\alpha - \mu_\alpha \hat{N}_\alpha) + \chi_\alpha \mu_\alpha \hat{N}_\alpha]$.

En el formalismo de superoperadores, 2.6 se transforma en

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

Si se utiliza el cuadro de interacción, esta ecuación se convierte en

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

En el cuadro de interacción, el superoperador de Liouville que incorpora el parámetro de conteo se transforma en

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

y la evolución temporal en el cuadro de interacción es

$$\frac{d}{dt} |\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle = \epsilon \check{\mathcal{L}}_\lambda(t) |\hat{\rho}_{totI}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle, \quad (2.7)$$

de este modo, la evolución de los grados de libertad del sistema reducido en el espacio de Hilbert queda descrita por

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\rho}}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) &= \epsilon^2 \int_0^t ds \left[-\text{Tr}_B \{ \hat{V}_\lambda(t) \hat{V}_\lambda(t-s) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \} - \text{Tr}_B \{ \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \hat{V}_{-\lambda}(t-s) \hat{V}_{-\lambda}(t) \} \right. \\ &\quad \left. + \text{Tr}_B \{ \hat{V}_\lambda(t) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \hat{V}_{-\lambda}(t-s) \} + \text{Tr}_B \{ \hat{V}_\lambda(t-s) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{\rho}_R^{eq} \hat{V}_{-\lambda}(t) \} \right], \quad (2.8) \end{aligned}$$

la demostración de esta ecuación se encuentra en el apéndice A.2.

Escribiendo una interacción de la forma

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

donde los operadores del baño representan operadores creación o destrucción, que cumplen

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

con $n_{\alpha,k}$ el número de partículas que se intercambia en la interacción k .

Y los operadores del sistema satisfacen

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

con $\hat{S}_{\alpha,k;j}$ los operadores de salto y ω_j las frecuencias de Bohr del Hamiltoniano del sistema.

Cabe mencionar que los operadores $\hat{S}_{\alpha,k}$ no necesitan ser autoadjuntos, a diferencia de los operadores de interacción considerados en 1.2.2.

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

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) = - \sum_{\alpha,k,k';j,j'} e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} \int_0^t ds \mathcal{I}(s, t), \quad (2.9)$$

donde

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}(s, t) &= e^{i\omega_{j'}s} C_{k,k'}^\alpha(s) \hat{S}_{\alpha,k;j}^\dagger \hat{S}_{\alpha,k';j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) + e^{-i\omega_{j'}s} C_{k,k'}^\alpha(-s) \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha,k;j}^\dagger \hat{S}_{\alpha,k';j'} \\
&- e^{-i\mu_\alpha n_{\alpha,k}(\lambda_\alpha - \chi_\alpha)} \left[e^{i\omega_{j'}s} C_{k,k'}^\alpha(s - \lambda_\alpha) + e^{-i\omega_{j'}s} C_{k,k'}^\alpha(-s - \lambda_\alpha) \right] \hat{S}_{\alpha,k';j'} \hat{\rho}_{IS}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t) \hat{S}_{\alpha,k;j}^\dagger. \quad (2.10)
\end{aligned}$$

Esta ecuación fue deducida en el Apéndice A.3.

2.5.1. Resolución finita de energía

De forma análoga a lo presentado en la sección 1.2.2, uno de los requisitos que se busca en la evolución de la ecuación maestra es que sea Markoviana. Para ello, se debe tomar el límite superior del integral en el tiempo, presente en la ecuación 2.9, hacia infinito. Esta aproximación es válida siempre que el tiempo de correlación del baño τ_B sea mucho menor al tiempo de relajación del sistema τ_R . Sin embargo, en presencia de parámetros de conteo λ_α , las funciones de correlación del baño adquieren una dependencia modificada en el tiempo, del tipo $C_{k,k'}^\alpha(\pm\tau - \lambda_\alpha)$. Por lo tanto, para que la aproximación markoviana sea válida en presencia de parámetros de conteo, se requiere que

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

Esto implica que el régimen de validez de la aproximación markoviana es

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

Esto tiene repercusiones importantes, ya que implica que la resolución de diferencias de energía en la medición del calor sea finita. Esta limitación se debe a que el parámetro λ_α y el calor medido en el baño Q_α son variables conjugadas en la distribución de probabilidad de calor y trabajo. Esto implica que ambas obedecen una relación de incertidumbre [31]. Como consecuencia las diferencias de energía del orden de $1/\tau_R$ dejan de ser confiables, ya que en ese régimen el valor promedio del calor es comparable con su varianza, es decir

$$\langle \Delta \lambda_\alpha^2 \rangle \langle (\Delta Q_\alpha)^2 \rangle \geq \gamma \implies \langle (\Delta Q_\alpha)^2 \rangle \geq \frac{\gamma}{\tau_R^2},$$

con γ alguna constante positiva. La profundidad de este resultado radica en que al aplicar una aproximación markoviana, la evolución del sistema sufre, de forma inherente, una resolución limitada respecto al calor intercambiado con los reservorios. Esta limitación puede conducir a inconsistencias termodinámicas, ya que se pierde información sobre fluctuaciones relevantes a escalas energéticas del orden $1/\tau_R$. Por lo tanto, para garantizar una evolución termodinámicamente consistente, es necesario redefinir las leyes de la termodinámica considerando explícitamente la resolución finita del calor impuesta por la dinámica.

2.5.2. Agrupación de frecuencias

La ecuación de Redfield no garantiza en general la preservación de la positividad, lo que puede llevar a la aparición de probabilidades negativas en la matriz densidad del sistema reducido. La forma más común de asegurar dicha positividad es aplicar la aproximación secular, vista en la sección 1.2.2, la cual conduce a una ecuación maestra en forma (GKLS).

Sin embargo, esta aproximación requiere que las frecuencias de Bohr estén bien separadas en comparación con $1/\tau_R$, lo cual excluye casos con frecuencias casi degeneradas. Esta condición impone una pérdida de efectos cuánticos significativos, ya que elimina los términos no seculares en la evolución temporal[32]. Para enfrentar esta limitación, puede considerarse un enfoque alternativo que conserve la positividad sin eliminar los términos no seculares.

Partimos de que la aproximación de Markov ($\tau_B \ll \tau_R$) garantiza que para dos frecuencias de transición distintas, se cumple al menos una de las siguientes condiciones:

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

Incluso, ambas pueden cumplirse simultáneamente. Es posible agrupar las frecuencias de transición en subconjuntos x_q , tal que frecuencias que cumplen la primera desigualdad pertenecen al mismo conjunto, mientras que aquellas que cumplen la segunda pertenecen a conjuntos distintos. Esto se traduce matemáticamente en

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

Notemos que para frecuencias $\omega_j, \omega_{j'}$ que están en distintos grupos, se cumple la aproximación secular, es decir los términos $e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t}$ oscilan rápidamente, por ende en promedio se anulan.

La función correlación espectral $\gamma^\alpha(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} C^\alpha(s)$, describe la influencia del baño

α en transiciones de estados con diferencia de energía ω , donde los ω corresponden a las frecuencias de Bohr del sistema. Dentro de un mismo conjunto x_q , los términos $e^{i\omega_j s}, e^{i\omega_{j'} s}$ contribuyen, respectivamente, a $\gamma^\alpha(\omega_j)$ y $\gamma^\alpha(\omega_{j'})$, es decir, describen transiciones inducidas por el baño con frecuencias cercanas ω_j y $\omega_{j'}$. Sin embargo, debido a la resolución finita del calor intercambiado con el reservorio, no es posible distinguir entre transiciones con frecuencias dentro del mismo conjunto x_q . Por lo tanto, en las funciones correlación espectral se deben sustituir las frecuencias individuales $\omega_j \in x_q$ por una frecuencia auxiliar ω_q , es decir en la ecuación 2.10 sustituir los términos

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

Esta sustitución refleja la incapacidad de distinguir transiciones con energías dentro del mismo conjunto x_q , y permite construir una descripción coarse-grained de la dinámica que respeta tanto la positividad como las limitaciones de resolución energética[33].

Usando este esquema en la ecuación 2.9 y extendiendo los límites del integral de \mathcal{I} de 0 a ∞ , se obtiene la ecuación en la forma GKLS

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

con

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

Los operadores de salto consisten en

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

Y el Hamiltoniano de *Lamb Shift*

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

con las cantidades

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

En donde se asume por simplicidad $C_{k,k'}^{\alpha} \propto \delta_{k,k'}$. La demostración de esta ecuación está incluida en el apéndice A.4.

En el límite en que los parámetros de conteo tienden a cero, se obtiene

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

con

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

La demostración de esta ecuación se encuentra en A.5.

Para un Hamiltoniano tiempo independiente, la ecuación maestra en el cuadro de Schro-

dinger 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

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

Hay dos límites importantes a considerar, el primero corresponde al caso en que todas las frecuencias satisfacen $|\omega_j - \omega_{j'}| \gg 1/\tau_R$, pues se cumple que $\mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k,q}] = \mathcal{D}[\hat{S}_{\alpha,k,j}]$, lo que permite realizar la aproximación secular entre todas las frecuencias de Bohr y recuperar la ecuación de Lindblad. En el caso de que se cumpla que $|\omega_j - \omega_{j'}| \ll 1/\tau_B$, todas las frecuencias se agrupan en un sólo grupo. Por lo tanto, los operadores del sistema cumplen que $\hat{S}_{\alpha,k;q} = \hat{S}_{\alpha,k}$, y la ecuación maestra queda descrita por operadores locales, lo que corresponde a la ecuación maestra local[34].

2.6. Consistencia termodinámica

Existen dos casos a diferenciar para derivar las leyes de la termodinámica, primero la ecuación maestra global definida en la sección 1.2.2 y segundo la ecuación maestra semilocal, que presenta un mayor desafío; debido a la resolución finita de energía impuesta por la dinámica markoviana en la ecuación semilocal, para asegurar la consistencia termodinámica es necesario redefinir las leyes de la termodinámica. Como primer paso, 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 $\omega_j \in x_q$. Este Hamiltoniano puede construirse mediante el Hamiltoniano \hat{H}_S , modificando sus autovalores de modo que todas las transiciones dentro de un mismo conjunto x_q compartan una frecuencia ω_q para $\omega_j \in x_q$.

Para las leyes de la termodinámica, se debe hacer la distinción para la ecuación maestra global y la semilocal, para el caso global la energía interna corresponde a

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

Por otro lado, para la ecuación maestra semilocal, la energía interna se redefine con el Hamiltoniano termodinámico mencionado anteriormente

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

La corriente de calor y el trabajo entregado por el baño α para la ecuación global será

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

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

Finalmente, la corriente de calor y el trabajo entregado por el baño α para el caso semilocal será

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

Estas definiciones automáticamente cumplen con la primera ley de la termodinámica, ya que si se deriva la energía interna para la ecuación global

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

También, si se aplica la relación de conmutación $[\hat{H}_{TD}, \hat{H}_S + \hat{H}_{LS}] = 0$, se obtiene la primera ley para el caso semilocal

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

2.6.1. Ley cero

Para la ecuación global, se cumple que el estado de equilibrio para el baño α es

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

además, si 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

$$\mathcal{L}_\alpha e^{-\beta_\alpha (\hat{H}_{TD} - \mu_\alpha \hat{N}_S)} = 0, \quad (2.13)$$

y el estado de Gibbs corresponde a

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

2.6.2. Segunda ley

Para definir la tasa de producción de entropía, se debe considerar la desigualdad de Spohn[35], que permite escribir las tasas de producción de entropía para el caso global y el semilocal[22]. Para el primero se cumple que

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

Mientras que para el segundo, la tasa de producción de entropía será

$$\dot{\sigma} = -\frac{d}{dt} \text{Tr}\{\hat{\rho}_S(t) \ln \hat{\rho}_S(t)\} - \sum_\alpha \beta_\alpha J_\alpha(t) = -\sum_\alpha \text{Tr}\{(\mathcal{L}_\alpha \hat{\rho}_S(t)) [\ln \hat{\rho}_S(t) - \ln \hat{\rho}_G(\beta_\alpha, \mu_\alpha)]\} \geq 0. \quad (2.14)$$

La demostración de 2.13 y de 2.14 se encuentra en el apéndice A.7.

De este modo, se definen las leyes de la termodinámica para las ecuaciones maestras global y semilocal, descritas por 1.12 y 2.11, respectivamente.

Capítulo 3

Flujos de información

En este capítulo se introduce el concepto de información termodinámica, comenzando en la sección 3.1 con una revisión del paradigma del Demonio de Maxwell. En la sección 3.2 se presenta el Demonio de Maxwell autónomo. Finalmente, en las secciones 3.3 y 3.6 se presenta el concepto de flujos de información, utilizando herramientas como la termodinámica estocástica en contexto clásico y la matriz densidad en contexto cuántico[13, 14]. modificar aqui

3.1. Demonio de Maxwell

El demonio de Maxwell es un experimento mental esbozado 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 una entidad denominada "Demonio", la cual tiene la capacidad de abrirla y cerrarla sin costo energético. La característica esencial del Demonio es que conoce la velocidad de cada partícula en ambos compartimientos.

Dado que la temperatura se relaciona con la velocidad promedio de las partículas, el Demonio puede discriminar entre partículas rápidas y lentas. De este modo, permite pasar del compartimiento A al B solo aquellas partículas cuya velocidad es mayor que la velocidad promedio, mientras que deja pasar del compartimiento B al A las partículas más lentas. Si se mantiene constante el número de partículas en cada compartimiento, este proceso da lugar a un aumento de la temperatura en A y una disminución en B, es decir, 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.

Del cálculo de la entropía total se concluye que, sin realizar trabajo externo, el Demonio logra una disminución de la entropía, lo cual representa una aparente violación de la segunda

ley de la termodinámica.

Sin embargo, esta paradoja fue resuelta posteriormente por Rolf Landauer, quien “exorcizó” al Demonio al señalar que, para que este pueda conocer la velocidad de las partículas, debe realizar mediciones. El proceso de medición, y en particular el borrado de la información asociada a dichas mediciones, implica una disipación de energía. Este resultado, conocido como el principio de Landauer, restablece la validez de la segunda ley[4].

En sistemas no autónomos, es decir sistemas manipulados por un agente externo a través del control de cantidades macroscópicas, la paradoja de Maxwell ha sido abordada extensamente. Un ejemplo clásico es el motor de Szilard[2], donde se ha logrado describir y “exorcizar” al Demonio cuantificando tanto la energía requerida para realizar una medición, como el costo energético asociado al borrado de la memoria del Demonio, y el trabajo máximo que puede extraerse mediante retroalimentación (feedback) [36, 37]. 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 merecen un análisis más detallado.

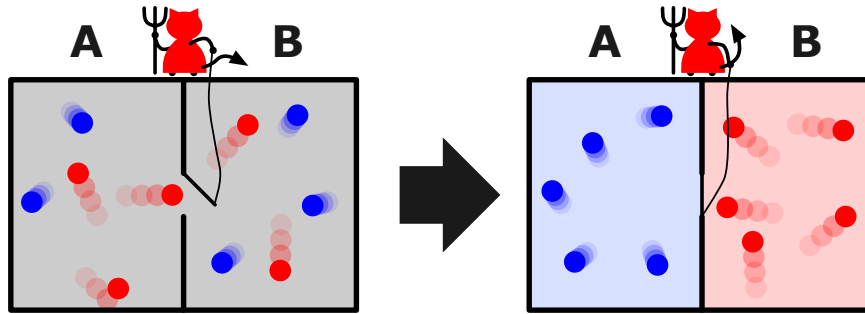


Figura 3.1: Esquema que representa al Demonio de Maxwell. Primero, consiste en los dos compartimientos que poseen el gas ideal distribuido de manera homogénea. Por último, al trasladar las partículas de un lado a otro, queda el compartimiento A con partículas frías mientras que el compartimiento B con partículas calientes. Esta figura fue tomada de [38] .

3.2. Demonio de Maxwell autónomo

Muchos procesos físicos requieren la interacción entre un conjunto de subsistemas que forman un sistema global. Esta interacción entre los subsistemas no sólo incluye un intercambio de energía o partículas, sino que también incluye un intercambio de información a medida que se correlacionan estos subsistemas entre sí de manera autónoma, es decir, sin un factor externo el cuál realice un feedback en él.

Comprender como son utilizados estos flujos de información para hacer tareas útiles es de gran relevancia. Un ejemplo claro se encuentra en los sistemas biológicos, donde ocurre adaptación sensorial, que corresponde al monitoreo que realiza un organismo a su ambiente mientras cambia su respuesta a él[39]. Para caracterizar este tipo de procesos, se considera un Demonio de Maxwell autónomo como un sistema bipartito. Donde una de sus partes consiste en el sistema controlado, mientras que la otra parte es el sistema que actúa como detector, el cuál ejerce control mediante una interacción física que afecta al sistema controlado.

Es fundamental que el sistema sea autónomo, es decir que el Hamiltoniano total sea tiempo independiente e intervenciones externas, tales como mediciones y feedback no son consideradas.

3.3. Descripción clásica

Para describir un demonio de Maxwell autónomo, es necesario poder calcular la evolución de un sistema acoplado a uno o más reservorios, y por lo tanto, sujeto a las leyes de la termodinámica.

Consideremos el caso de dos sistemas independientes, X e Y , cada uno con estados discretos denotados por x e y , respectivamente. Ambos sistemas presentan una dinámica interna caracterizada por saltos aleatorios entre sus respectivos estados, cuya tasa de transición está determinada por los reservorios locales a los que cada subsistema se encuentra acoplado. Estas tasas cumplen la condición de *balance detallado local* [40].

La evolución entre estados se modela como un proceso de Markov[41]. Para estudiar la evolución conjunta del sistema, se asume un acoplamiento bipartito: en este contexto, esto significa que si el sistema total se encuentra en un estado conjunto (x, y) , sólo se permiten transiciones del tipo $(x, y) \rightarrow (x, y')$ o $(x, y) \rightarrow (x', y)$, pero no transiciones simultáneas del tipo $(x, y) \rightarrow (x', y')$.

Esta estructura garantiza que la dinámica conjunta del sistema XY siga siendo markoviana, y que la probabilidad $p(x, y)$ de encontrar al sistema en el estado (x, y) esté gobernada por la siguiente ecuación maestra:

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

Donde $W_{x, x'}^{y, y'}$ representa la razón de transición para un salto del estado (x', y') al estado (x, y) . Esta razón obedece 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 las razones de transición con el cambio de energía $\Delta\epsilon = \epsilon_{x, y} - \epsilon_{x', y'}$ asociado al salto. Esta energía es intercambiada con el reservorio térmico local en forma de calor.

Debido a que el sistema es bipartito, la forma de las razones de transición corresponde a

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

En términos de la corriente de probabilidad

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

la ecuación maestra puede reescribirse como

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

Donde

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

representa la corriente de probabilidad correspondiente a un salto entre los estados $y' \rightarrow y$, manteniendo fijo el estado x . Es decir, describe el flujo en la dirección Y para un valor dado de x . De manera análoga, $J_{x, x'}^y$ describe el flujo en la dirección X para un valor fijo de y .

Este hecho es importante, ya que la estructura bipartita permite separar las corrientes de probabilidad en dos componentes: una correspondiente a transiciones en la dirección X , y otra en la dirección Y . Esta propiedad puede ser aprovechada para estudiar funcionales de la corriente, es decir, cantidades de la forma

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

que pueden ser separados 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 este modo, la variación de \mathcal{A} se puede descomponer en dos contribuciones: una asociada a las transiciones en la dirección X , y otra correspondiente a las 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, constituye un sistema abierto que debe satisfacer la segunda ley de la termodinámica. Esta ley exige que la tasa de producción de entropía sea siempre mayor o igual que cero, es decir

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

Donde $\partial_t S^{XY}$ corresponde a la derivada temporal de la entropía del sistema, que se expresa como

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

Y el cambio de entropía en el ambiente corresponde a

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

por ende

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

Estos resultados se demuestran en el apéndice B.1.

Una vez definida la tasa de producción de entropía, es necesario cuantificar la información compartida entre los dos subsistemas. La magnitud que permite medir las correlaciones entre ellos es la información mutua, la cual captura las correlaciones estadísticas entre las variables X e Y . Se define por

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

De este modo, cuando I_{XY} es grande, los dos subsistemas están fuertemente correlacionados, mientras que I_{xy} pequeña implica que los dos sistemas se conocen poco entre ellos, $I_{XY} = 0$ indica que son estadísticamente independientes.

Para definir los flujos de información, es necesario calcular la variación temporal de la información mutua. Esta puede descomponerse en dos contribuciones asociadas a las dinámicas 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 . Que explícitamente son

$$\begin{aligned} \dot{I}^X &= \sum_{x \geq x'; y} J_{x,x'}^y \ln \frac{p(y|x)}{p(y|x')} \\ \dot{I}^Y &= \sum_{x; y \geq y'} J_x^{y,y'} \ln \frac{p(x|y)}{p(x|y')}. \end{aligned}$$

La demostración de este resultado también está en el apéndice B.1.

Los términos \dot{I}^X y \dot{I}^Y cuantifican cómo fluye la información entre los dos subsistemas. Si $\dot{I}^X > 0$, significa que un salto en la dirección X , en promedio, aumenta la información mutua I_{xy} ; es decir, el subsistema X está “aprendiendo” o midiendo al subsistema Y .

En cambio, si $\dot{I}^X < 0$, los saltos en la dirección X reducen las correlaciones, lo que puede interpretarse como un consumo de información con el fin de extraer trabajo o energía.

Como la tasa de producción de entropía es un funcional de la corriente de probabilidad, se puede usar la ecuación 3.1 para escribir:

$$\dot{\sigma} = \dot{\sigma}^X + \dot{\sigma}^Y,$$

así

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

donde se pueden identificar las tasas de producción de entropía locales

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

Y en función de los flujos de información son

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

Estas dos ecuaciones permiten visualizar cómo la contribución de la información influye en la producción de entropía local de cada subsistema.

Supongamos que se desconoce la existencia de la interacción entre el subsistema Y y el subsistema X , y que únicamente se monitoriza la dinámica de X . En ese caso, se le asignaría al sistema una tasa de producción de entropía dada por:

$$\dot{\sigma}_0^X = \partial_t S^X + \dot{S}_r^X.$$

Si el subsistema X estuviera efectivamente aislado, se cumpliría $\dot{\sigma}_0^X \geq 0$, en concordancia con la segunda ley de la termodinámica. Sin embargo, debido a su interacción con Y , pueden darse situaciones en las que $\dot{\sigma}_0^X < 0$, lo cual representa una violación aparente de la segunda ley. Esta puede interpretarse como el efecto de un Demonio de Maxwell, que utiliza la información que proviene de monitorear X .

En la evolución de sistemas autónomos que alcanzan un estado estacionario, se cumple que $\partial_t I_{xy} = 0$. En ese régimen, el flujo de información se conserva:

$$\dot{\mathcal{I}} = \dot{I}^X = -\dot{I}^Y,$$

y la producción de entropía local de cada subsistema se puede escribir como:

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

Supongamos el caso en que $\dot{\mathcal{I}} > 0$. En esta situación, se puede interpretar que el subsistema X está actuando como un sensor, al monitorear activamente al subsistema Y . Para realizar esta función de monitoreo, el subsistema X debe disipar una cantidad mínima de energía tal que:

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

Por otro lado, el subsistema Y está proporcionando información, la cual puede ser aprovechada para extraer energía del entorno. En este caso, se cumple que:

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

Esta relación es importante, ya que permite utilizar información para realizar trabajo útil en sistemas fuera del equilibrio, o incluso para extraer calor de un reservorio caliente.

Un ejemplo característico de este fenómeno se encuentra en sistemas sometidos a un gradiente de potencial, donde el Demonio de Maxwell se manifiesta a través del surgimiento de una corriente de partículas en contra del gradiente. Este efecto será analizado en detalle en las secciones posteriores.

3.5. Descripción cuántica

Para describir los flujos de información en un contexto cuántico, es necesario conocer la dinámica de un sistema cuántico abierto acoplado a uno o varios reservorios. Para ello, se utilizará la matriz densidad, la cual describe la evolución del sistema reducido. El sistema total estará descrito por el Hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_I$. Y la evolución markoviana de este sistema conduce a una ecuación maestra

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

El acoplamiento del sistema con múltiples reservorios α se modela a través de un generador de Lindblad, que se descompone como

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

donde cada superoperador \mathcal{L}_{α} representa la interacción del sistema con el reservorio α .

Si se asume que cada reservorio induce un equilibrio local descrito por un estado de Gibbs

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

entonces es posible aplicar la desigualdad de Spohn [42], para obtener una formulación generalizada de la segunda ley de la termodinámica, en términos de una desigualdad de Clausius para la tasa de producción de entropía local asociada al reservorio α , es decir

$$-\text{Tr}[(\mathcal{L}_{\alpha} \hat{\rho}_S)(\ln \hat{\rho}_S - \ln \hat{\rho}_{\text{eq}}^{\alpha})] \geq 0. \quad (3.2)$$

Cabe señalar, que este resultado se mantiene válido si el estado estacionario esta descrito por el Hamiltoniano termodinámico \hat{H}_{TD} , en lugar del Hamiltoniano físico \hat{H}_S .

Si se define la cantidad

$$\dot{S}^{\alpha} = -\text{Tr}\{(\mathcal{L}_{\alpha} \hat{\rho}_S) \ln \hat{\rho}_S\}, \quad (3.3)$$

como la tasa de cambio de la entropía de von Neumann del sistema inducida por el acoplamiento al reservorio α , con la entropía definida por

$$S = -\text{Tr}\{\hat{\rho}_S \ln \hat{\rho}_S\}, \quad (3.4)$$

y se identifica el flujo de calor en el segundo término de la desigualdad de Spohn (ver ecuación 3.2), se obtiene una expresión para la tasa de producción de entropía local asociada al reservorio α :

$$\dot{\sigma}^{\alpha} = \dot{S}^{\alpha} - \beta_{\alpha} \dot{Q}^{\alpha} \geq 0. \quad (3.5)$$

Esta desigualdad corresponde a una forma local de la segunda ley de la termodinámica, donde

\dot{Q}^α es el flujo de calor hacia el sistema desde el reservorio α , y β_α su inversa de temperatura. El término $\dot{\sigma}^\alpha$ representa la producción neta de entropía asociada a dicho contacto, y es

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

que actúa como una inecuación de Clausius parcial. Esto es importante, ya que localmente se puede separar la producción de entropía en cantidades mayor a cero, similar a como se hizo en la descripción clásica. De hecho si se suman todas las tasas de cambio de entropía, se obtiene la derivada total $\partial_t S = \sum_\alpha \dot{S}^\alpha$, por lo tanto al sumar todas las producciones de entropía locales

$$\sum_\alpha \dot{\sigma}^\alpha = \partial_t S - \sum_\alpha \beta_\alpha J_\alpha = \dot{\sigma} \geq 0,$$

que corresponde a la inecuación de Clausius estándar.

Se puede notar que para el caso estacionario $\partial_t S = 0$, no necesariamente \dot{S}^α es cero. Sino que depende del flujo de calor que entra localmente por el disipador α . También se puede tratar la inecuación para la energía libre, primero definiendo la corriente de energía y calor correspondientes al baño α

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

En este caso se usa el Hamiltoniano \hat{H}_S para escribir la tasa de cambio de la energía interna, sin embargo si el estado estacionario contiene \hat{H}_{TD} , entonces el flujo de energía es $\dot{E}_\alpha = \text{Tr}[(\mathcal{L}_\alpha \hat{\rho}_S) \hat{H}_{TD}]$.

Se cumple que la suma de las corrientes de energía provenientes de los distintos reservorios corresponde a la derivada temporal de la energía interna del sistema

$$\sum_\alpha \dot{E}_\alpha = \partial_t E.$$

En el caso de un Hamiltoniano independiente del tiempo, no se realiza trabajo mecánico, por lo que sólo se considera trabajo químico. En consecuencia, la energía intercambiada con cada reservorio se descompone como

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

Multiplicando la ecuación 3.6 por la temperatura del reservorio T_α y reemplazando J_α mediante la expresión anterior, se obtiene

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

donde se ha definido la tasa de variación de la energía libre asociado al reservorio α como

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

La inecuación 3.7 consiste en una inecuación local de energía libre. Si se suman las inecuaciones de todos los reservorios, se tendrá

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

donde $\dot{W} = \sum_{\alpha} \dot{W}_{\alpha}$ y la tasa de cambio de energía libre total es

$$\dot{\mathcal{F}} = \partial_t E - \sum_{\alpha} T_{\alpha} \dot{S}^{\alpha}.$$

Para el caso particular, en qué todas las temperaturas son iguales, la tasa de cambio de energía libre $\dot{\mathcal{F}}$ se vuelve equivalente a la derivada temporal de la energía libre $\partial_t F = \partial_t(E - TS)$. Sólo en este caso 3.6 y 3.8 son equivalentes.

En el caso isotérmico, se cumple en el estado estacionario que $\dot{\mathcal{F}} = \partial_t F = 0$, lo que implica $\dot{W} > 0$. Por lo tanto, el sistema no puede realizar trabajo neto si sólo va a intercambiar calor con reservorios a la misma temperatura. La única forma de obtener trabajo neto del sistema, o sea, lograr que $\dot{W} < 0$, es mediante la presencia de reservorios con distinta temperatura. En tal caso, la tasa de cambio de energía libre no se anula y es $\dot{\mathcal{F}} = -\sum_{\alpha} T_{\alpha} \dot{S}^{\alpha} \neq 0$.

3.6. Flujos de información en contexto cuántico

Suponga un sistema compuesto por dos subsistemas acoplados, descrito por el Hamiltoniano total

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

donde \hat{H}_i representa el Hamiltoniano del subsistema $i = X, Y$, y \hat{H}_{XY} corresponde al término de interacción entre los dos subsistemas. Se asume, además, que cada subsistema está acoplado a un conjunto distinto de reservorios. En particular, los reservorios asociados al subsistema i serán denotados por α_i . Esto permite describir la tasa de producción de entropía local de cada subsistema como

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

por lo tanto, la tasa de producción de entropía total del sistema corresponde a $\dot{\sigma} = \dot{\sigma}^X + \dot{\sigma}^Y$.

De forma análoga a lo realizado en la descripción clásica, se busca establecer una relación entre las producciones locales de entropía y la información compartida entre subsistemas. Para ello, se utilizará la información mutua entre los dos subsistemas, definida como

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

donde $S_i = -\text{Tr}\{\hat{\rho}_i \ln \hat{\rho}_i\}$ es la entropía de Von Neumann del subsistema $i = X, Y$, y $\hat{\rho}_i$ consiste en la matriz densidad del subsistema i .

Se puede separar la derivada temporal de la información mutua

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

donde aparece el flujo de información correspondiente a cada subsistema $i = X, Y$, como la cantidad $\dot{I}^i = \partial_t S^i - \sum_{\alpha_i} \dot{S}^{\alpha_i}$. Luego, si se reemplaza $\sum_{\alpha_i} \dot{S}^{\alpha_i} \rightarrow \partial_t S_i - \dot{I}^i$, en las tasas de producción de entropía locales, quedan las inecuaciones

$$\begin{aligned}
\dot{\sigma}^X &= \partial_t S^X - \sum_{\alpha_X} \beta_{\alpha_X} J_{\alpha_X} - \dot{I}^X \geq 0 \\
\dot{\sigma}^Y &= \partial_t S^Y - \sum_{\alpha_Y} \beta_{\alpha_Y} J_{\alpha_Y} - \dot{I}^Y \geq 0,
\end{aligned}$$

este resultado coincide con el obtenido en la descripción clásica. No obstante, su formulación en términos de entropía de von Neumann permite incorporar de forma natural los efectos cuánticos presentes en el sistema, lo cual resulta fundamental para caracterizar los flujos de información en regímenes donde las correlaciones cuánticas y las coherencias desempeñan un rol relevante.

Si se considera que el subsistema i está conectado a un reservorio isotérmico de temperatura T_i , la tasa de cambio de la energía libre será

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

En el estado estacionario se cumple la relación

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

y la tasa de cambio de energía libre del subsistema i es

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

Así, la tasa de cambio de la energía libre posee dos contribuciones: una correspondiente al intercambio de energía y otra asociada al flujo de información. Si se considera el régimen estacionario, donde la energía total permanece constante, es decir

$$\partial_t E = \dot{E}^X + \dot{E}^Y = 0,$$

entonces los términos \dot{E}^i pueden interpretarse como flujos de energía entre los dos subsistemas. En este contexto, la tasa de cambio de energía libre para cada subsistema se descompone en una parte asociada al intercambio energético y otra vinculada al flujo de información generado por las correlaciones entre los subsistemas.

En el caso $\dot{E}^X = \dot{E}^Y \approx 0$, esta descomposición permite que el sistema realice trabajo a

partir de una contribución dominante de la información, incluso en ausencia de diferencias térmicas significativas. Tal mecanismo constituye lo que se conoce como una máquina de la información, en la que los flujos de información entre subsistemas juegan un rol principal, permitiendo la extracción de trabajo en un régimen puramente informacional.

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 4.1 se introduce el Hamiltoniano del sistema reducido y su entorno. Posteriormente, en la sección 4.2, se analiza el comportamiento del sistema en un escenario típico de transporte cuántico. En la sección 4.3, 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, se compara este comportamiento con su contraparte clásica, destacando las diferencias inducidas por los efectos cuánticos.

4.1. Modelo teórico

El sistema reducido está compuesto por tres puntos cuánticos. Uno de ellos posee un nivel de energía 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 , además de una interacción de Coulomb U_f . Cada uno de los niveles de energía se encuentra acoplado a un baño distinto.

La configuración del sistema reducido se ilustra en la Figura 4.1.

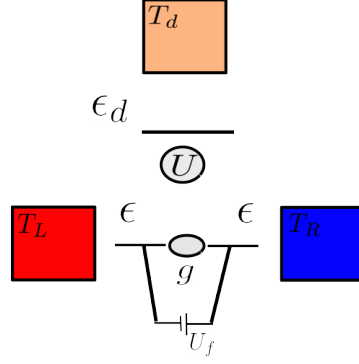


Figura 4.1: Esquema que representa el sistema reducido compuesto por tres puntos cuánticos, modelados como tres niveles de energía. Estos niveles presentan interacción de Coulomb repulsiva entre ellos, y cada uno está acoplado a un baño térmico distinto.

El Hamiltoniano del sistema reducido esta dado por

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

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

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

Usando la base de Fock $|n_L, n_R, n_D\rangle = (\hat{d}_L^\dagger)^{n_L} (\hat{d}_R^\dagger)^{n_R} (\hat{d}_D^\dagger)^{n_D} |0, 0, 0\rangle$, y escribiendo el Hamiltoniano en el orden de la base

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

se puede representar el Hamiltoniano del sistema en forma matricial

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

Por otro lado, el Hamiltoniano del baño y la interacción con el sistema se descomponen como $\hat{H}_B = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_D$ y $\hat{V} = \hat{V}_L + \hat{V}_R + \hat{V}_D$ respectivamente. Cada término esta dado por

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

donde $\alpha = L, R, D$ denota los tres reservorios acoplados a cada punto cuántico, $\hat{c}_{\alpha, l}$ son los operadores de aniquilación de los modos del reservorio α , $\epsilon_{\alpha l}$ sus energías, y $t_{\alpha l}$ los parámetros de acoplamiento entre el sistema y baño.

A partir del término de interacción \hat{V} , es posible identificar los operadores asociados al sistema y al baño

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

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

La evolución no unitaria del sistema de tres puntos cuánticos, inducida por su acoplamiento a los baños, se describe mediante una ecuación maestra descrita por el operador de Lindblad

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

donde el operador de Lindblad \mathcal{L} se descompone como una suma de contribuciones individuales, una por cada baño acoplado al sistema. Explícitamente cada contribución \mathcal{L}_i corresponde a

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_R = & \gamma_R(\epsilon)(f_R(\epsilon)\mathcal{D}_0[\hat{d}_R^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_L)] + [1 - f_R(\epsilon)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_L)]) \\ & + \gamma_R(\epsilon + U)(f_R(\epsilon + U)\mathcal{D}_0[\hat{d}_R^\dagger \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_L)] + [1 - f_R(\epsilon + U)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_R \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_L)]) \\ & + \gamma_R(\epsilon + U_f)(f_R(\epsilon + U_f)\mathcal{D}_0[\hat{d}_R^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_L] + [1 - f_R(\epsilon + U_f)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_L]) \\ & + \gamma_R(\epsilon + U + U_f)(f_R(\epsilon + U + U_f)\mathcal{D}_0[\hat{d}_R^\dagger \hat{n}_D \hat{n}_L] + [1 - f_R(\epsilon + U + U_f)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_R \hat{n}_D \hat{n}_L]) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_L = & \gamma_L(\epsilon)(f_L(\epsilon)\mathcal{D}_0[\hat{d}_L^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_R)] + [1 - f_L(\epsilon)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_R)]) \\ & + \gamma_L(\epsilon + U)(f_L(\epsilon + U)\mathcal{D}_0[\hat{d}_L^\dagger \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_R)] + [1 - f_L(\epsilon + U)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_L \hat{n}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_R)]) \\ & + \gamma_L(\epsilon + U_f)(f_L(\epsilon + U_f)\mathcal{D}_0[\hat{d}_L^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_R] + [1 - f_L(\epsilon + U_f)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_R]) \\ & + \gamma_L(\epsilon + U + U_f)(f_L(\epsilon + U + U_f)\mathcal{D}_0[\hat{d}_L^\dagger \hat{n}_D \hat{n}_R] + [1 - f_L(\epsilon + U + U_f)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_L \hat{n}_D \hat{n}_R]) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_D = & \gamma_D(\epsilon_d)(f_D(\epsilon_d)\mathcal{D}_0[\hat{d}_D^\dagger(\mathbf{1} - \hat{n}_R)(\mathbf{1} - \hat{n}_L)] + [1 - f_D(\epsilon_d)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_D(\mathbf{1} - \hat{n}_R)(\mathbf{1} - \hat{n}_L)]) \\ & + \gamma_D(\epsilon_d + U)f_D(\epsilon_d + U)\mathcal{D}_0[\hat{d}_D^\dagger(\hat{n}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_L) + \hat{n}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_R))] \\ & + \gamma_D(\epsilon_d + U)[1 - f_D(\epsilon_d + U)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_D(\hat{n}_R(\mathbf{1} - \hat{n}_L) + \hat{n}_L(\mathbf{1} - \hat{n}_R))] \\ & + \gamma_D(\epsilon_d + 2U)(f_D(\epsilon_d + 2U)\mathcal{D}_0[\hat{d}_D^\dagger \hat{n}_R \hat{n}_L] + [1 - f_D(\epsilon_d + 2U)]\mathcal{D}_0[\hat{d}_D \hat{n}_R \hat{n}_L]). \end{aligned}$$

Con $f_i(\omega) = (\exp(\beta_i(\omega - \mu_i)) + 1)^{-1}$ y el operador \mathcal{D}_0

$$\mathcal{D}_0[\hat{A}]\hat{\rho} = \hat{A}\hat{\rho}\hat{A}^\dagger - \frac{1}{2}\{\hat{A}^\dagger\hat{A}, \hat{\rho}\}.$$

La demostración de la ecuación 4.1 se presenta en los apéndices C.2 y C.3.

Despreciando el término de *Lamb Shift* \hat{H}_{LS} , como se discute en [23], la evolución del sistema de tres puntos cuánticos está dada 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. A partir de esta ecuación, es posible calcular numéricamente la evolución del sistema y obtener las magnitudes termodinámicas relevantes.

4.2. Estudio del transporte

Se aborda inicialmente el caso en que las razones de túnel no dependen de la frecuencia, es decir, $\gamma_i(\omega) = \gamma_i$. Y se estudia el flujo de corriente generado por una diferencia de potencial $\mu_L - \mu_R = eV$, empleando las razones de túnel $\gamma_L = \gamma_R = 1/100$ y $\gamma_d = 1/50$. Los resultados se muestran en la Figura 4.2.

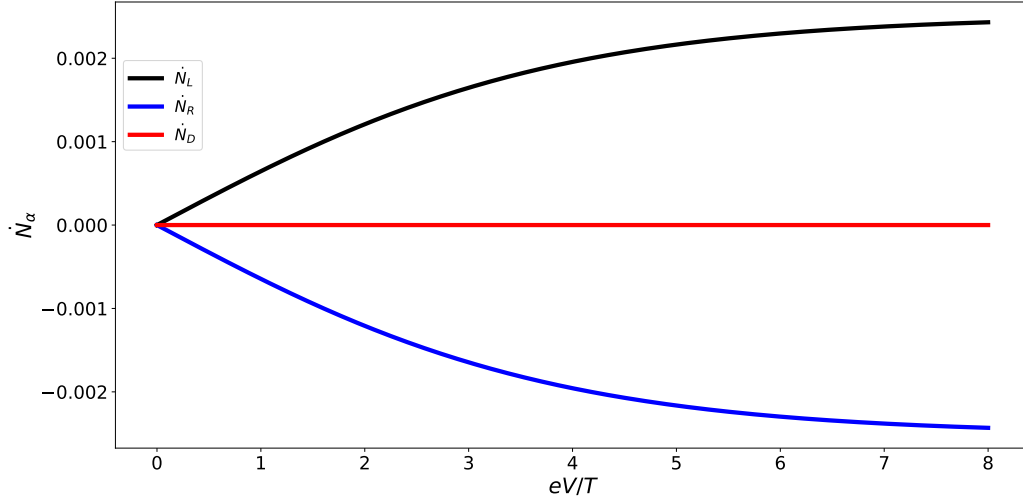


Figura 4.2: Corriente de partículas en función de la razón eV/T . Las temperaturas de los reservorios son $T_L = T_R = 100$ y $T_d = 2$. El parámetro de acoplamiento se fija en $g = \frac{5}{1000}$. Las energías de sitio corresponden a $\epsilon = 0$ y $\epsilon_d = \mu_d - \frac{U}{2}$, mientras que 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 aumenta. Este comportamiento es consistente con lo esperado, ya que un mayor potencial químico en el reservorio L impulsa el transporte hacia R . Asimismo, se puede analizar la potencia suministrada al sistema en función de eV .

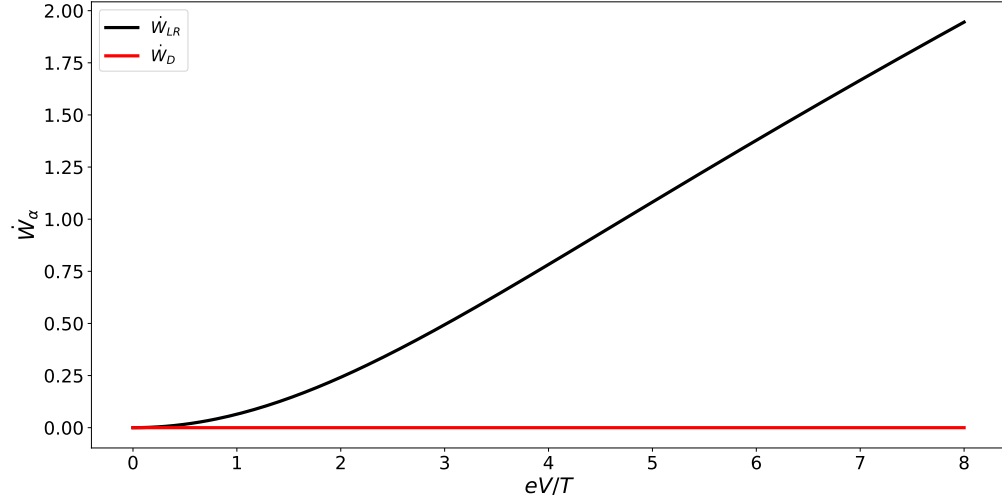


Figura 4.3: Potencia entregada por los reservorios en función de eV/T .

La Figura 4.3 muestra que el conjunto de reservorios L y R entrega trabajo al sistema para mantener la corriente de partículas. Este comportamiento es consistente desde el punto de vista físico, ya que el paso de electrones desde un potencial químico mayor hacia uno menor implica una transferencia de energía al sistema, que se manifiesta como trabajo. Por otro lado, dado que el reservorio D no intercambia partículas en promedio, la potencia que este entrega es nula.

Asimismo, pueden examinarse los flujos de calor que reciben los sistemas LR y D

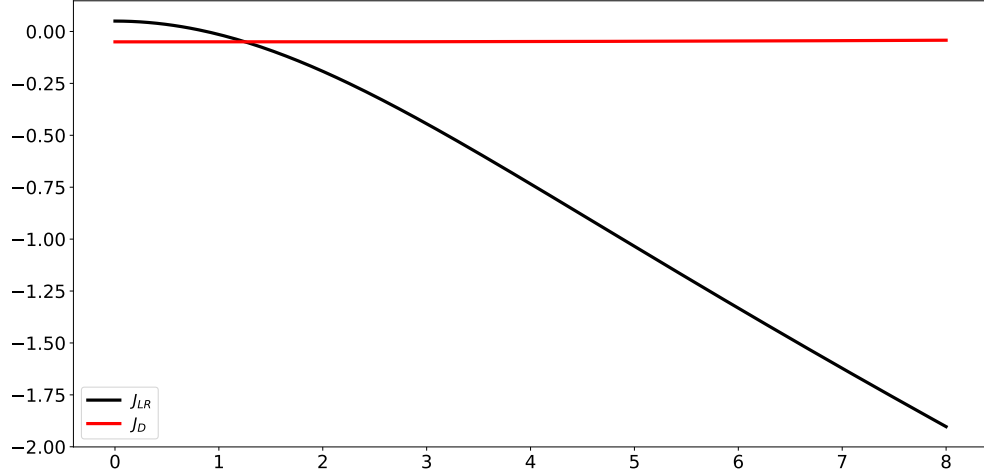


Figura 4.4: Flujo de calor recibido por los sistemas LR y D en función de eV/T .

Como uno puede ver, para $eV/T \lesssim 2$, el sistema LR en total recibe calor de los reservorios L y R . Para $eV/T \gtrsim 2$ el sistema LR en total entrega calor a los reservorios L y R .

Para completar el análisis termodinámico a partir de la primera ley $\dot{E}_\alpha = J_\alpha + \dot{W}_\alpha$, se

grafican a continuación los flujos de energía involucrados

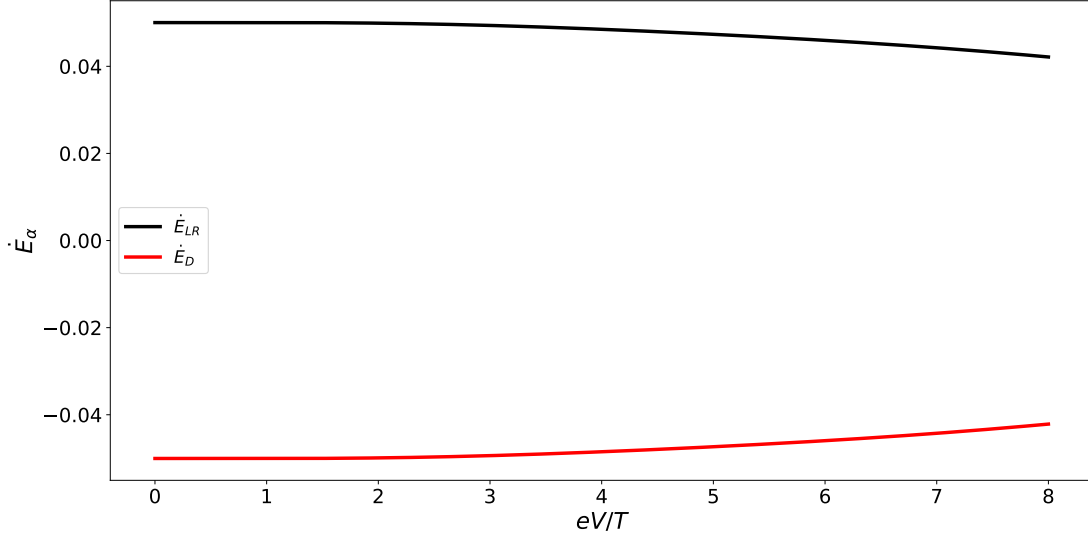


Figura 4.5: Flujo de energía entregado por los reservorios en función de eV/T .

En el estado estacionario, la condición $\partial_t E = 0$ implica que $\dot{E}_{LR} = -\dot{E}_d$, lo cual se observa en la Figura 4.5. Allí, el flujo de energía hacia el sistema LR es positivo, mientras que el flujo desde el subsistema D es negativo. Esto indica que el sistema LR recibe energía proveniente de los reservorios L y R , la cual es posteriormente transferida al subsistema D y desde allí al reservorio D . Este comportamiento es coherente con el hecho de que la temperatura del reservorio D es menor ($T_d < T_L = T_R$), y por lo tanto, el flujo de calor se dirige desde los reservorios más calientes hacia el más frío.

Para analizar la presencia de efectos cuánticos en el estado estacionario, se calcularán dos cantidades relevantes. La primera de ellas es la norma- l_1 , \mathcal{C}_{l_1} , que permite cuantificar las coherencias en el sistema LR .

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

otro efecto cuántico relevante de estudiar es el entrelazamiento entre modos específicos del sistema. En particular, se analiza 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 este tipo de correlaciones no clásicas se utiliza la concurrencia \mathcal{C}_{on} [43, 44], 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 fórmula se presenta en el Apéndice C.7.

Finalmente, en la Figura 4.6 se analiza cómo varían la coherencia y la concurrencia en función de la diferencia de potencial

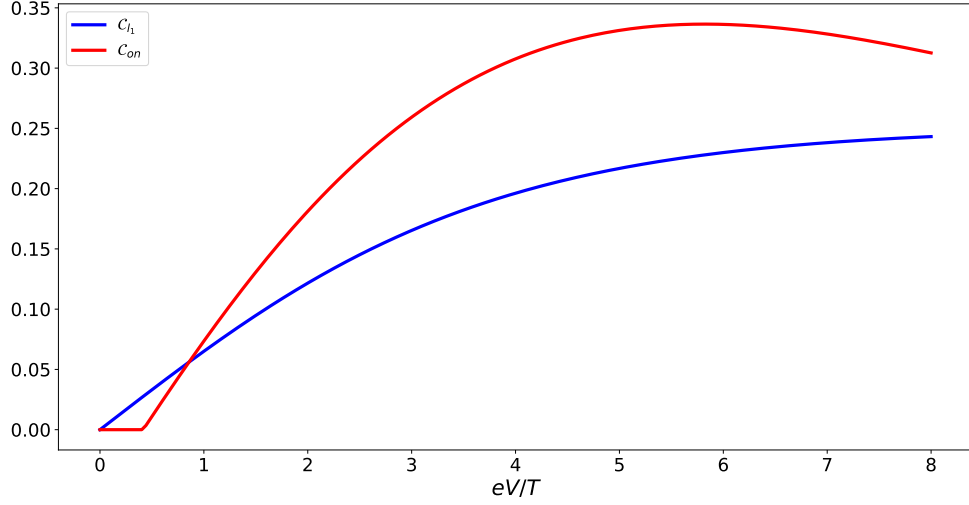


Figura 4.6: Coherencia(línea azul) y concurrencia(linea roja) en función de eV/T .

En este caso, la coherencia comienza en cero y aumenta progresivamente a medida que se incrementa la diferencia de potencial. En cuanto al entrelazamiento, también parte desde cero —coincidiendo con el valor nulo de la coherencia— y se mantiene nulo hasta alcanzar un cierto umbral, a partir del cual la concurrencia comienza a crecer con el aumento de eV/T . Esto indica la aparición de entrelazamiento en el sistema LR . Este comportamiento es relevante, ya que sugiere que la presencia de una corriente en el sistema contribuye a que se desarrollen coherencia y entrelazamiento entre los sitios L y R .

4.3. Demonio de Maxwell en 3 puntos cuánticos

Para que el sistema de tres puntos cuánticos se comporte como un Demonio de Maxwell autónomo, es fundamental tratarlo como un sistema bipartito compuesto por dos subsistemas: por un lado, el subsistema LR , que consiste en dos niveles de energía ϵ ; por otro, el nivel ϵ_D , que desempeña el rol de demonio.

Para que este último actúe como demonio, debe ser capaz de detectar cambios en el subsistema LR , ejecutando una acción análoga a una medición. Gracias a la interacción de Coulomb U , el demonio puede distinguir si el subsistema LR está vacío, ocupado o doblemente ocupado. A su vez, el subsistema LR modifica su dinámica dependiendo del estado de ocupación del demonio.

Esta retroalimentación se implementa matemáticamente al modificar las razones de túnel $\gamma_i(\epsilon + U) \neq \gamma_i(\epsilon)$, con $i = L, R$.

Para que el demonio pueda detectar eficazmente el estado del subsistema LR , deben cumplirse dos condiciones. Primero, que la energía de interacción supere las fluctuaciones térmicas del reservorio asociado al demonio, es decir, $\beta_D U \gg 1$. Segundo, que su dinámica disipativa sea más rápida que la del subsistema LR , lo que implica $\gamma_D > \max\{\gamma_i, \gamma_i^U\}$ con $i = L, R$.

La dinámica específica del demonio se describirá con mayor detalle en la Figura 4.7.

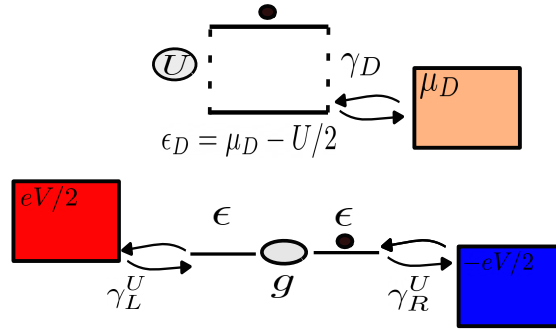


Figura 4.7: Primer paso en la dinámica, el sitio D y el sitio R poseen una mayor probabilidad de estar ocupados.

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 $\gamma_R^U > \gamma_L^U$, de modo que las transiciones sean más frecuentes hacia el baño derecho, aumentando así la probabilidad de que este nivel se pueble. Posteriormente, como se ilustra en la Figura 4.8, el acoplamiento g permite el intercambio coherente del electrón entre los niveles L y R , introduciendo así una dinámica esencialmente cuántica.

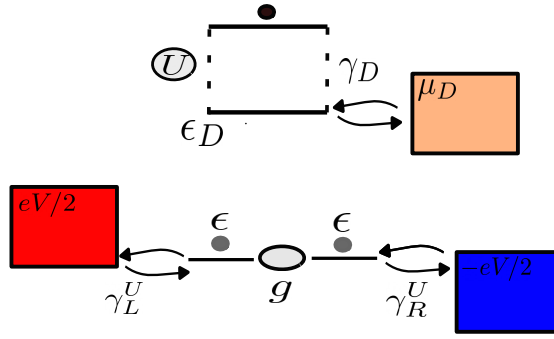


Figura 4.8: Segundo paso en la dinámica, el hopping g genera superposición entre los sitios L y R .

Finalmente, se produce una tercera etapa, ilustrada en la Figura 4.9. En esta fase, con el objetivo de generar un flujo de corriente en contra del gradiente de potencial, resulta conveniente imponer que $\gamma_L > \gamma_R$. Esta condición asegura que, cuando el demonio se encuentra desocupado, la probabilidad de que ocurra una transición hacia el nivel L sea mayor que hacia el nivel R . Como consecuencia, se favorece el transporte de electrones desde el reservorio R (de menor potencial) hacia el reservorio L (de mayor potencial), evidenciando así un comportamiento característico de un Demonio de Maxwell autónomo.

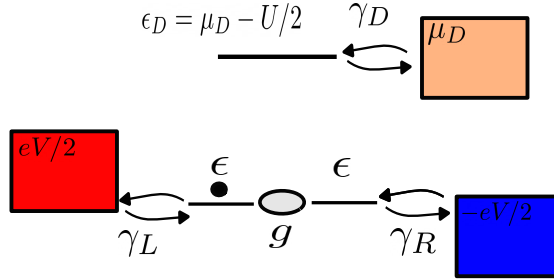


Figura 4.9: Tercer paso en la dinámica, el electrón se transporta al baño L .

Teniendo definida la dinámica del sistema, es posible elegir de forma adecuada distintos candidatos para las razones 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. Como se muestra en la Figura 4.10, 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. En cambio, para $eV/T \gtrsim 2.4$, la ocupación ρ_{101} domina, indicando una mayor interacción entre los puntos L y D .

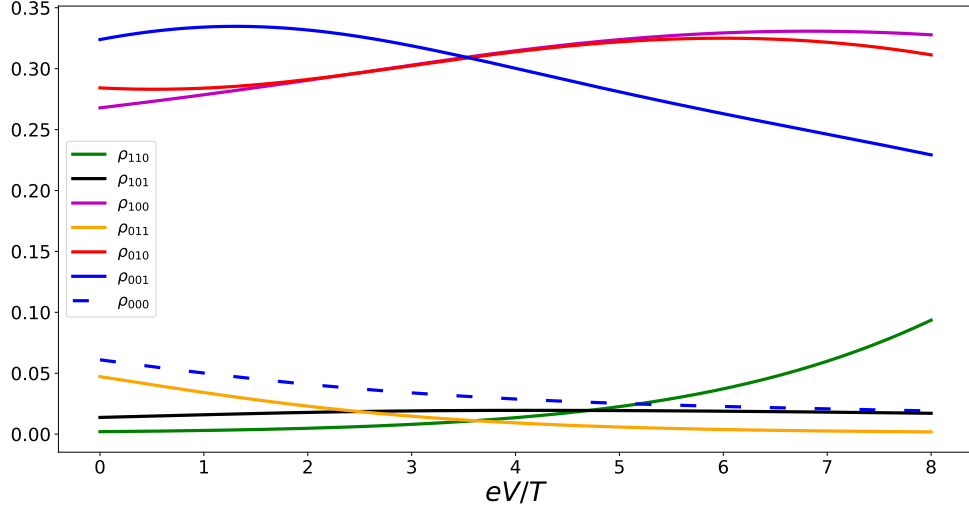


Figura 4.10: Elementos diagonales de la matriz densidad en función de eV/T .

El comportamiento de un Demonio de Maxwell autónomo se refleja en las cantidades termodinámicas del sistema. En la Figura 4.11 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.

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 tipo Maxwell. En particular, como se ilustró en la Figura 4.7, dicho régimen requiere una interacción simultánea entre los puntos R y D . Sin embargo, al dominar ρ_{101} , esta dinámica se ve suprimida.

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, dada por $\dot{\sigma}_{LR}^o = d_t S_{LR} - \sum_{i=L,R} J_i/T$, cuya evolución en función de eV/T se muestra en la Figura 4.12.

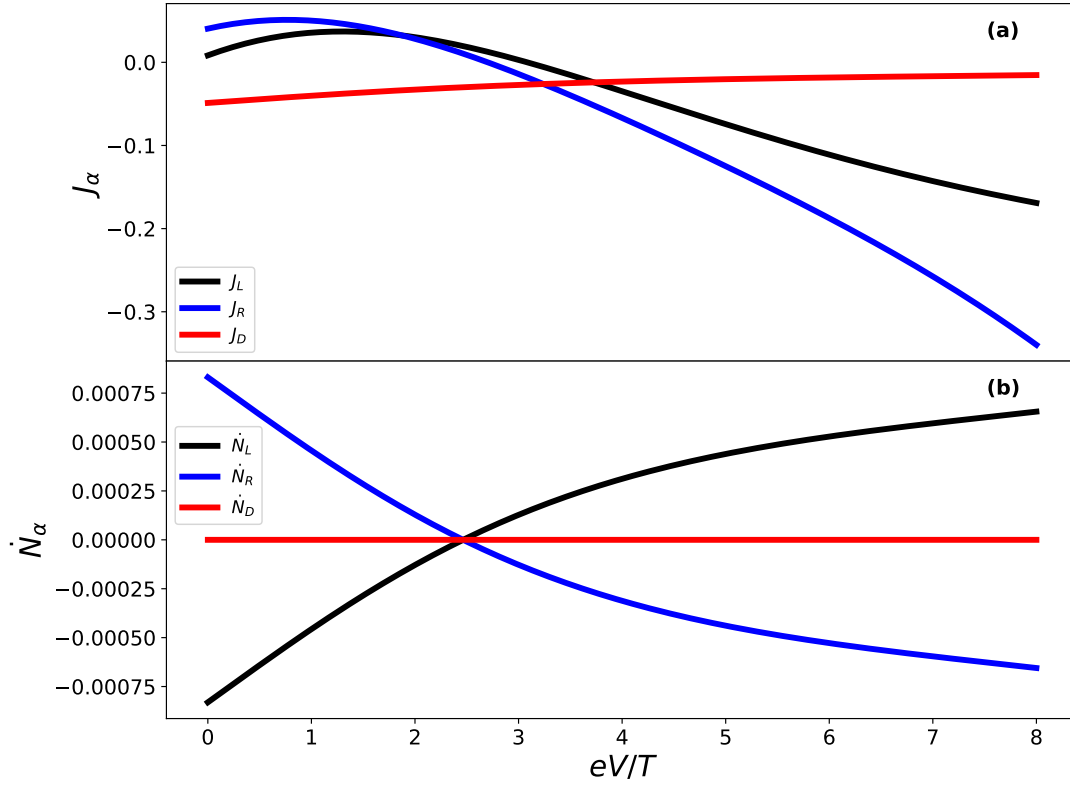


Figura 4.11: (a) Flujos de calor liberados por cada reservorio α . (b) Flujos de corriente de partículas correspondientes a cada reservorio. Los resultados se obtuvieron considerando temperaturas $T = 100$ y $T_d = 2$, niveles de energía $\epsilon = 0$ y $\epsilon_d = \mu_d - U/2$ con potencial químico $\mu_d = 2$, razones de túnel $\gamma_L = \gamma_R^U = 1/100$, $\gamma_R = \gamma_L^U = 1/600$, $\gamma_D = \gamma_D^U = 1/50$, acoplamiento entre los sitios $g = 5/1000$ e interacciones de Coulomb $U = 40$ y $U_F = 500$.

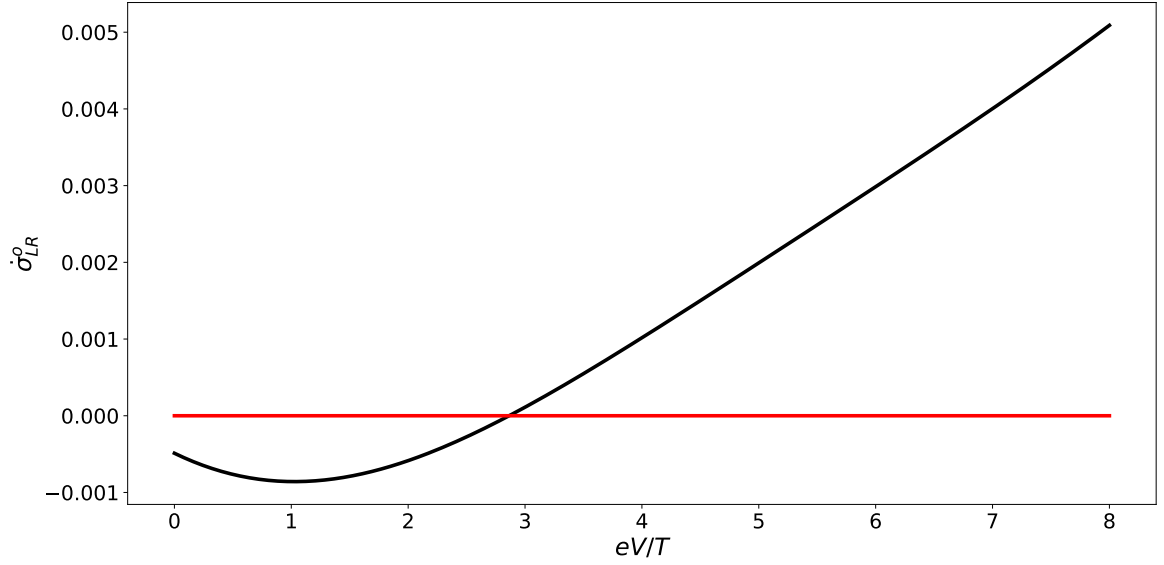


Figura 4.12: Tasa de producción de entropía aparente del sistema $LR(\dot{\sigma}_{LR}^o)$ en función de eV/T .

En la Figura 4.12 se grafica la tasa de producción de entropía aparente, donde se observa que para $eV/T \lesssim 2.4$, 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 incorporar la contribución del flujo de información en el cálculo de la tasa de producción de entropía, se obtiene la Figura 4.13, en la cual se verifica que la producción total de entropía en el sistema LR permanece siempre positiva.

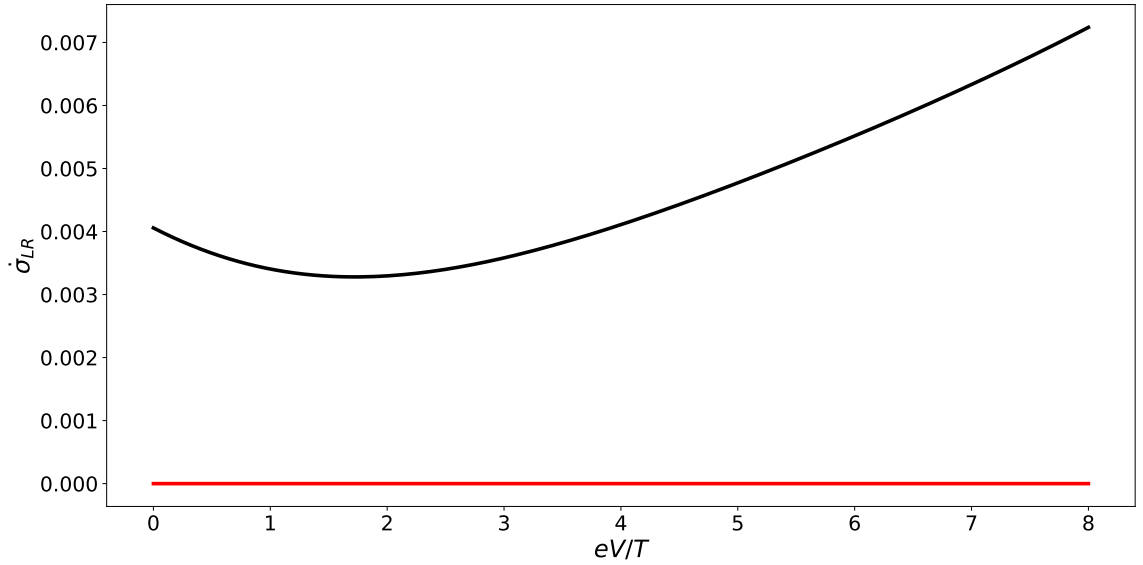


Figura 4.13: Tasa de producción de entropía del sistema $LR(\dot{\sigma}_{LR})$ en función de eV/T .

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 se cumple:

$$\dot{E}_L + \dot{E}_R + \dot{E}_d = \partial_t E = \dot{E}_{LR} + \dot{E}_d = 0.$$

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.

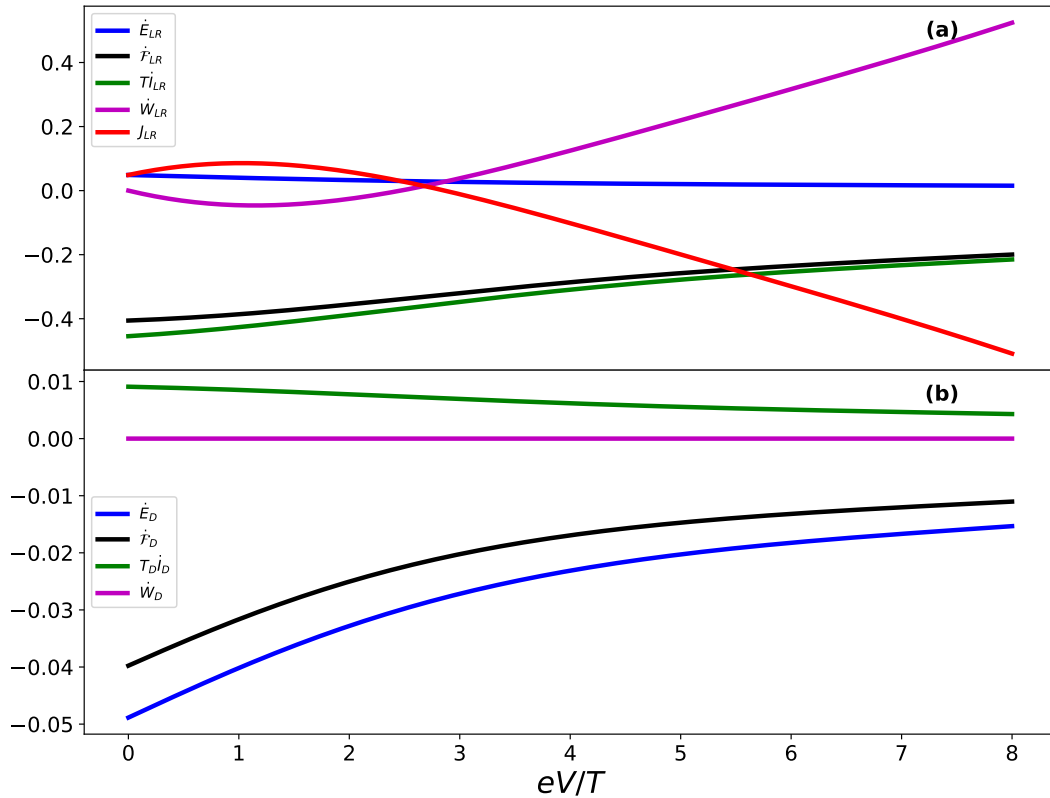


Figura 4.14: Flujo de energía, tasa de cambio de energía libre, flujo de información, potencia y flujo de calor del sistema LR . (b) Flujo de energía, tasa de cambio de energía libre, flujo de información y potencia del Demonio.

La Figura 4.14 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 ($T_d < T$).

Este comportamiento puede entenderse también como el de una máquina térmica, donde el sistema total extrae calor del reservorio caliente (J_{LR}), transforma parte de él en trabajo útil (\dot{W}_{LR}), y disipa el resto en el baño frío (J_d), cumpliendo así $J_{LR} + J_d = -\dot{W}_{LR}$.

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 4.15.

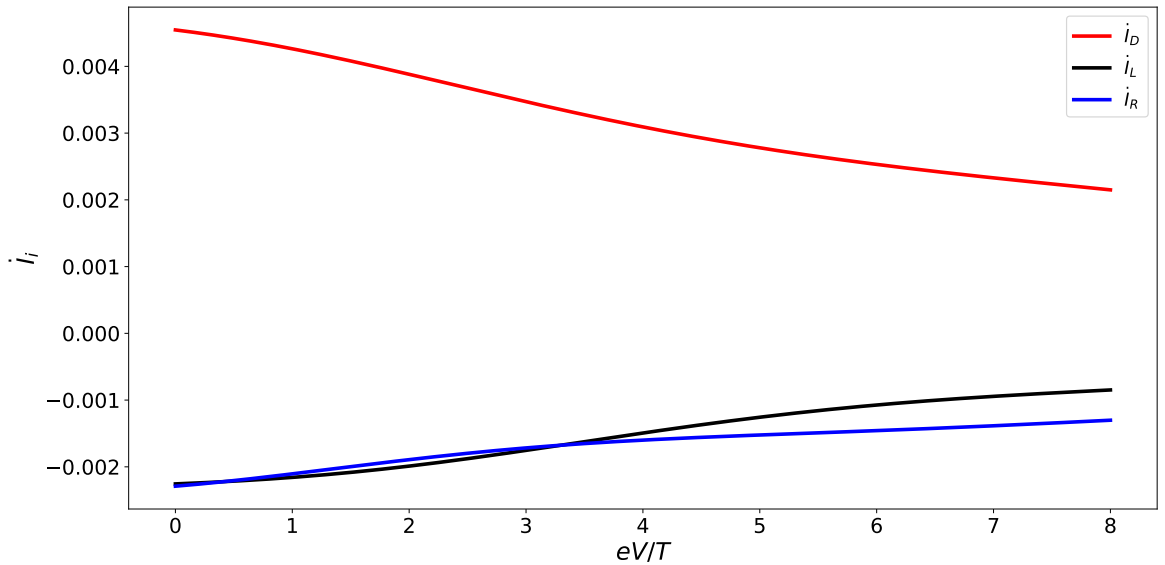


Figura 4.15: Flujos de información de cada sitio, L, R y D .

Es interesante notar que, cuando $eV/T \gtrapprox 3.6$, el menor flujo de información proviene del punto cuántico R , mientras que para $eV/T \lesssim 3.6$, el sitio L es el menor, y por ende entrega más información a D . Esta transición se correlaciona con los resultados observados en la Figura 4.10, donde se muestra que, a medida que aumenta eV/T , la probabilidad de ocupación del estado ρ_{110} supera a la de ρ_{011} .

Este comportamiento es consistente con la intuición física: un mayor potencial favorece la ocupación del punto cuántico L , mientras que la asimetría en las razones de túnel está diseñada para promover la ocupación de R . Esta competencia reduce la eficacia de la dinámica asociada al mecanismo tipo Demonio de Maxwell, descrita en las Figuras 4.7, 4.8 y 4.9.

La clave de este mecanismo es que el subsistema D debe ser capaz de monitorear el estado de ocupación del punto R , para luego permitir una transición hacia L cuando se encuentra desocupado. Sin embargo, al aumentar la probabilidad de ocupación de L , se interrumpe esta dinámica, lo que reduce el flujo de información desde ese sitio. Como consecuencia, el flujo

informativo asociado a L crece con eV/T , llegando a superar el de 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 ($|1, 0\rangle, |0, 1\rangle$).

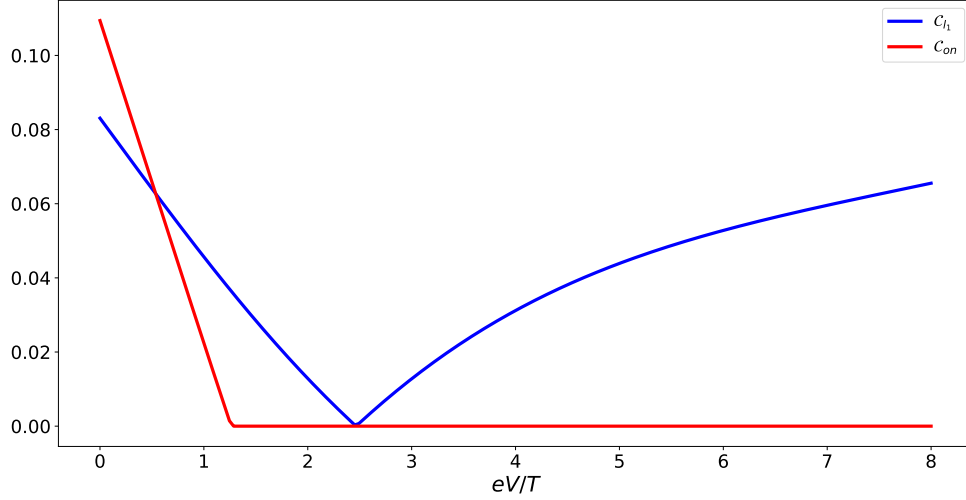


Figura 4.16: En línea azul la norma- l_1 de la coherencia \mathcal{C}_{l_1} y en línea roja la concurrencia \mathcal{C}_{on} .

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 nuevamente a medida que crece eV/T . 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 estas cantidades cuánticas se ven influenciadas por el parámetro de acoplamiento g . Para ello, se comenzará analizando las cantidades termodinámicas.

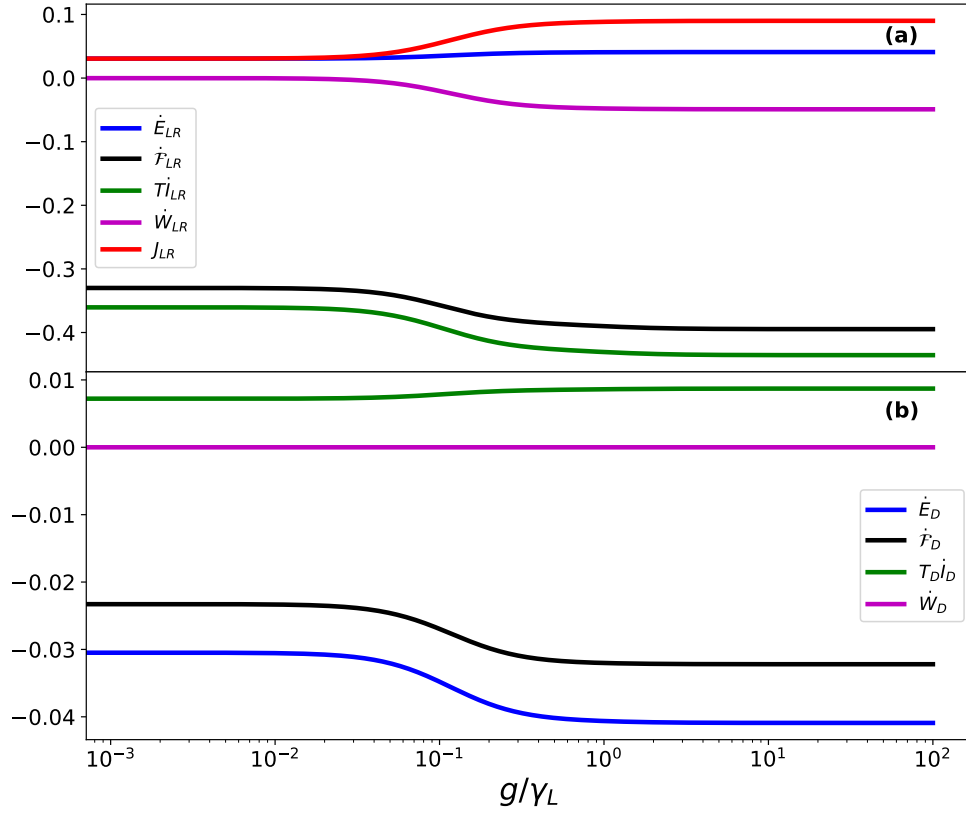


Figura 4.17: Cantidades termodinámicas para el sistema LR y el Demonio en función de g/γ_L , considerando $eV/T = 1$ y el resto de parámetros corresponden a los de la Figura 4.11.

Se observa que cuando el acoplamiento g alcanza valores comparables con la tasa de túnel γ_L , tanto la potencia generada como la contribución informacional del subsistema LR aumentan. Este resultado sugiere que un acoplamiento suficientemente fuerte entre el sistema y el demonio potencia la conversión de información en trabajo.

Además, bajo esta misma condición $g \sim \gamma_L$, el valor absoluto del flujo de energía del demonio \dot{E}_d también se incrementa, 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 4.18, donde se aprecia la dependencia de los flujos informacionales con respecto al parámetro g .

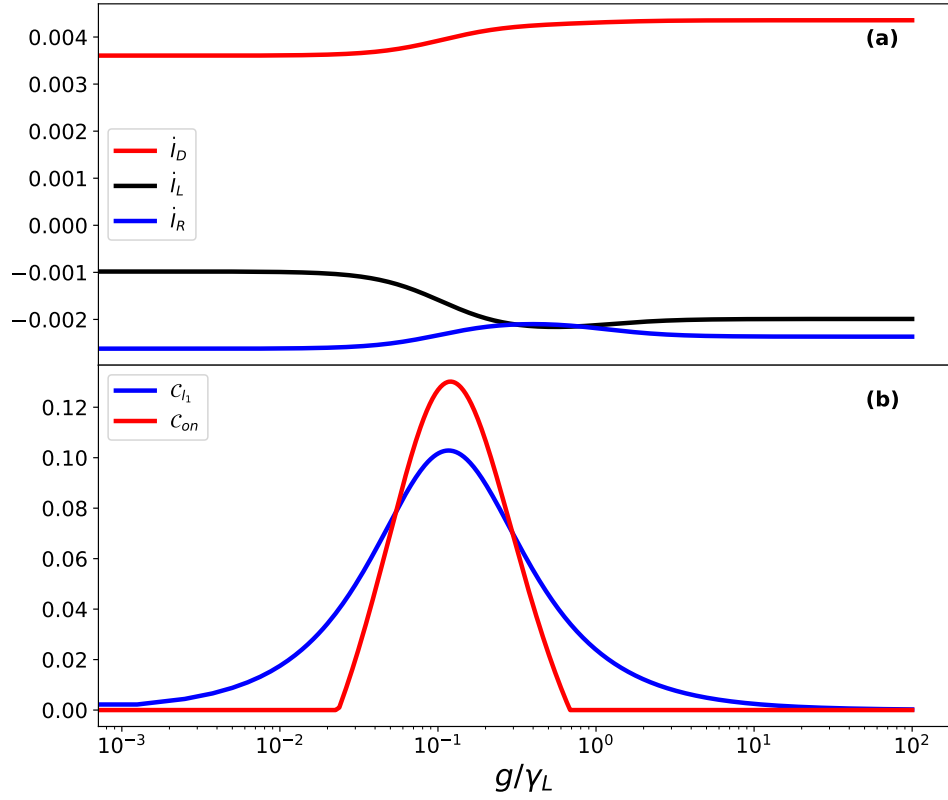


Figura 4.18: (a)Flujos de información de cada sitio. (b)Concurrencia y coherencia en función de g/γ_L .

Un comportamiento notable se presenta cuando el acoplamiento alcanza valores comparables a la tasa de túnel, es decir, $g \sim \gamma_L$. En este régimen, tanto la concurrencia 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. 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 $g \sim \gamma_L$. 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 puramente(semi) clásica, limitada a las componentes diagonales de la matriz de densidad del sistema, la cual está gobernada por

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}_S(t)\rangle\rangle = (\check{\mathcal{L}}_0 - \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0^{-1}\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}})\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}_S(t)\rangle\rangle, \quad (4.3)$$

En este contexto, la evolución del sistema está gobernada por el superoperador total $\check{\mathcal{L}}_f$, definido como

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

que combina la dinámica coherente del sistema con la disipación inducida por los baños. 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

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

Por otro lado, el operador inverso $\check{\mathcal{L}}_0^{-1}$ se define a través del inverso de Drazin del operador $\check{\mathcal{L}}_0$ como:

$$\check{\mathcal{L}}_0^{-1} = - \int_0^\infty d\tau e^{\check{\mathcal{L}}_0 \tau} \check{\mathcal{Q}},$$

según lo discutido en [45]. Finalmente, $\check{\mathcal{P}}$ y $\check{\mathcal{Q}}$ son los operadores de proyección de Nakajima-Zwanzig sobre las partes diagonal y no diagonal de la matriz densidad del sistema, respectivamente. La demostración detallada de esta ecuación se encuentra en el Apéndice C.8.

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), y se descompone como $\mathbf{W} = \sum_\alpha \mathbf{W}_\alpha$, donde \mathbf{W}_α representa la contribución del baño α .

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 4.19 y 4.20.



Figura 4.19: 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 4.20: Elementos diagonales ρ_{101} , ρ_{000} , ρ_{011} y ρ_{001} en función de eV/T .

De las Figuras 4.19 y 4.20 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 debe al 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{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

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

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

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

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

La versión cuántica de los flujos de información se encuentra detallada en el apéndice C.10. En la Figura 4.21 se muestra una comparación gráfica entre los casos clásico y cuántico para estas cantidades.



Figura 4.21: 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 4.21, en el régimen $eV/T \lesssim 2.4$ la corriente de partículas calculada en el caso cuántico es menor a la del caso clásico. Por otro lado, para $eV/T \gtrsim 2.4$ la corriente de partículas en el caso cuántico es mayor que en el caso clásico. Es decir, el comportamiento cuántico mejora el transporte de partículas, ya sea en contra o a favor del gradiente de potencial.

Como se observa en la Figura 4.21, 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.10).

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 ciertos regímenes de eV/T en los cuales el sistema exhibe un comportamiento análogo al de un Demonio de Maxwell autónomo. En estos regímenes, 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 $g \sim \gamma_L$, 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 $eV/T \lesssim 2$, 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 fundamental 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 [46]. 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 [47].

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] 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.
- [25] 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.
- [26] Manzano, D., “A short introduction to the lindblad master equation”, *Aip advances*, vol. 10, no. 2, 2020.
- [27] 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.
- [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] Strasberg, P. y Esposito, M., “Non-markovianity and negative entropy production rates”, *Physical Review E*, vol. 99, no. 1, p. 012120, 2019.
- [30] Zwanzig, R. W., “Statistical mechanics of irreversibility”, *Quantum Statistical Mechanics*, p. 139, 1966.
- [31] Folland, G. B. y Sitaram, A., “The uncertainty principle: a mathematical survey”, *Journal of Fourier analysis and applications*, vol. 3, pp. 207–238, 1997.
- [32] Trushechkin, A., “Unified gorini-kossakowski-lindblad-sudarshan quantum master equation beyond the secular approximation”, *Physical Review A*, vol. 103, no. 6, p. 062226, 2021.

- [33] Chruściński, D. y Pascazio, S., “A brief history of the gkls equation”, *Open Systems & Information Dynamics*, vol. 24, no. 03, p. 1740001, 2017.
- [34] 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.
- [35] 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.
- [36] 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.
- [37] Sagawa, T. y Ueda, M., “Second law of thermodynamics with discrete quantum feedback control”, *Physical review letters*, vol. 100, no. 8, p. 080403, 2008.
- [38] Htkym, “Maxwell’s demon”, 2007, <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.
- [39] 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.
- [40] 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.
- [41] Van Kampen, N., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland Publishing Co, 1992.
- [42] Spohn, H., “Entropy production for quantum dynamical semigroups”, *Journal of Mathematical Physics*, vol. 19, no. 5, pp. 1227–1230, 1978.
- [43] Hill, S. A. y Wootters, W. K., “Entanglement of a pair of quantum bits”, *Physical review letters*, vol. 78, no. 26, p. 5022, 1997.
- [44] Wootters, W. K., “Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits”, *Physical Review Letters*, vol. 80, no. 10, p. 2245, 1998.
- [45] 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.
- [46] 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.
- [47] 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.
- [48] 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.
- [49] 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.
- [50] Schinabeck, C., “Hierarchical quantum master equation approaches to nonequilibrium

charge transport through single-molecule junctions”, 2019.

- [51] Riley, K. F., Hobson, M. P., y Bence, S. J., Mathematical methods for physics and engineering: a comprehensive guide. Cambridge university press, 2006.
- [52] 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.
- [53] 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 2.3, se obtiene la expresión

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

Considerando un observable $\hat{A}(0)$ con descomposición espectral asociada a los proyectores \hat{P}_{a_0} , al aplicarlos sobre un estado diagonal de densidad $\hat{\rho}_{\text{diag}}$, se obtiene la identidad[48]

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

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

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

A.2. Matriz de densidad generalizada

La ecuación 2.7 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 de 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 operador 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 de 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 de 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 $\check{\mathcal{P}}|\dot{\hat{\rho}}_{\text{tot},I}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle = |\dot{\hat{\rho}}_{I,S}(\vec{\lambda}, \vec{\chi}, t)\rangle\rangle \otimes |\hat{\rho}_R^{eq}\rangle\rangle$ 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 2.8.

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 la relación

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

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 2.9 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

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

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

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

Que es la ecuación que se quiere demostrar.

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

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

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, empezamos calculando al derivada temporal de la entropía de Von Neumann

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

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

Partiendo de 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 y de 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 $x \geq x'$ y $y \geq y'$, 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 representan las contribuciones individuales debidas a la dinámica en los grados de libertad X y 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

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

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

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

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

$$C_1^\alpha(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega s} \gamma_\alpha(\omega) f_\alpha(\omega),$$

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

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

$$\Gamma_1^\alpha(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} C_1^\alpha(s) = \gamma_\alpha(-\omega) f_\alpha(-\omega),$$

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

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 identificar los operadores de salto, primeramente se elimina el término de acoplamiento del Hamiltoniano del sistema 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

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

Por otro lado

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

lo que implica

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_+ e^{-i\hat{H}_S t} &= e^{-i\epsilon_+ t} \hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_-) + e^{-i(\epsilon_+ + U_f)t} \hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_- \\ &\quad + e^{-i(\epsilon_+ + U)t} \hat{d}_+(\mathbf{1} - \hat{n}_-)\hat{n}_D + e^{-i(\epsilon_+ + U + U_f)t} \hat{d}_+\hat{n}_D\hat{n}_-, \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_- e^{-i\hat{H}_S t} &= e^{-i\epsilon_- t} \hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_D)(\mathbf{1} - \hat{n}_+) + e^{-i(\epsilon_- + U_f)t} \hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_D)\hat{n}_+ \\ &\quad + e^{-i(\epsilon_- + U)t} \hat{d}_-(\mathbf{1} - \hat{n}_+)\hat{n}_D + e^{-i(\epsilon_- + U + U_f)t} \hat{d}_-\hat{n}_+\hat{n}_D. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_R e^{-i\hat{H}_S t} &= \cos(\theta/2) e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_- e^{-i\hat{H}_S t} + \sin(\theta/2) e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_+ e^{-i\hat{H}_S t}, \\ e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_L e^{-i\hat{H}_S t} &= -\sin(\theta/2) e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_- e^{-i\hat{H}_S t} + \cos(\theta/2) e^{i\hat{H}_S t} \hat{d}_+ e^{-i\hat{H}_S t}. \end{aligned}$$

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 $\epsilon_L = \epsilon_R$ 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, 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. 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

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

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

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

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

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

Finalmente, 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 de forma coherente la frecuencia $\epsilon + U_f$ al operador $\hat{d}_L \hat{n}_R (\mathbf{1} - \hat{n}_D)$. 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_-) , así 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

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

por lo tanto, 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. Límitaciones de la aproximación semilocal

C.5. Aspecto Markoviano de las funciones correlación

Para que el sistema descrito en la sección 4.1 exhiba un comportamiento análogo al de un Demonio de Maxwell autónomo, es necesario que las tasas de túnel $\gamma_i(\omega)$ respondan de manera diferenciada dependiendo de si el sitio D se encuentra ocupado o desocupado. Sin embargo, no toda dependencia funcional de $\gamma_i(\omega)$ 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

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

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

La distribución de Fermi puede ser aproximada mediante desarrollos de Padé [49, 50], lo que permite expresarla como una sumatoria

$$f_F(x) \approx \frac{1}{2} - \sum_{l=0}^N \frac{2\kappa_l x}{x^2 + \xi_l^2}, \quad (\text{C.6})$$

los coeficientes κ_l y ξ_l pueden ser calculados numéricamente y se encuentran tabulados en [49]. Para evaluar numéricamente la función de correlación, es necesario especificar una forma explícita para $\gamma_i(\omega)$, la cual debe presentar un máximo en cierta frecuencia característica ϵ_0 . Una elección común consiste en considerar un perfil lorentziano dado por

$$\gamma_i(\omega) = \gamma_0 + \frac{\gamma_f W^2}{(\omega - \epsilon_0)^2 + W^2},$$

donde W representa el ancho de la lorentziana, γ_0 y γ_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 bien 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 .

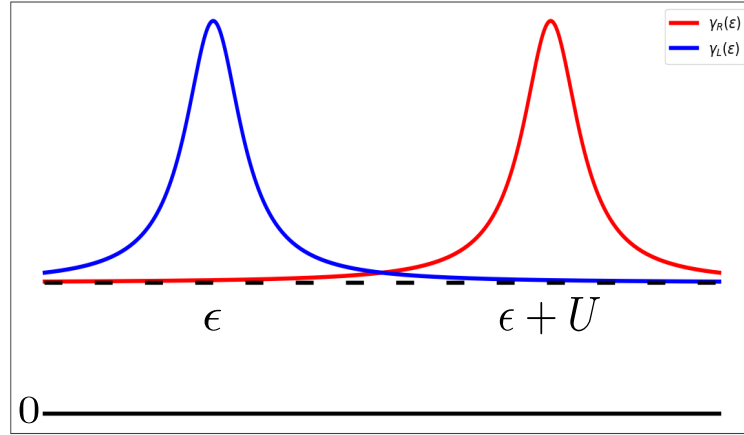


Figura C.1: Tasas de túnel en función de las frecuencias ω .

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

$$\begin{aligned}\gamma_i(\epsilon_0) &= \gamma_0 + \gamma_f \\ \gamma_i(\epsilon_0 + U) &= \gamma_0 + \frac{\gamma_f W^2}{U^2 + W^2}.\end{aligned}$$

A partir de estas igualdades, es posible determinar los parámetros γ_0 , γ_f y W . Sustituyendo la expresión de $\gamma_i(\omega)$ en la función de correlación, se obtiene

$$C_i^\sigma(t) = \frac{\gamma_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)) + \frac{\gamma_f}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} \left[\frac{W^2}{(\omega - \epsilon_0)^2 + W^2} \right] f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)),$$

la función de correlación puede descomponerse en dos contribuciones

$$C_0^\sigma(t) = \frac{\gamma_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} f_F(\sigma\beta(\omega-\mu)) \quad C_f^\sigma(t) = \frac{\gamma_f}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} \left[\frac{W^2}{(\omega - \epsilon_0)^2 + W^2} \right] f_F(\sigma\beta(\omega-\mu)),$$

y se podrá determinar el tiempo de correlación del baño como $\tau_B = \max\{\tau_{B0}, \tau_{Bf}\}$. Se comenzará calculando una expresión analítica aproximada para la función de correlación $C_f^\sigma(t)$. Para resolver esta integral, será necesario localizar los polos en el plano complejo. Según C.6, 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 [51], 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

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

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

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

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

$$C_f^\sigma(t) \approx \sum_{l=0}^N \eta^{\sigma,l} e^{-\gamma_{\sigma,l} t}, \quad (\text{C.7})$$

donde

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

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

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

$$C_0^\sigma(t) = \frac{\gamma_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} f_F(\sigma\beta(\omega - \mu)).$$

Se puede comenzar observando 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

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(f[\sigma\omega])(-\sigma t) &= \frac{\gamma_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{i\sigma\omega t}}{e^{\sigma\beta\omega} + 1} \\ &= \frac{\gamma_0}{4\pi} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\sigma\omega t} \tanh\left(\frac{\sigma\beta\omega}{2}\right) \right] \\ &= \frac{\gamma_0}{2} \left[\delta(t) - \frac{i}{\beta\sigma \sinh(\pi t/\beta\sigma)} \right], \end{aligned}$$

así

$$C_0^\sigma(t) = \frac{\gamma_0}{2} e^{-i\sigma\mu t} \left[\delta(t) - \frac{i}{\beta\sigma \sinh(\pi t/\beta\sigma)} \right].$$

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.6. Cálculo numérico para los tiempos de correlación

Dado que es posible reconstruir las tasas de túnel $\gamma_L(\omega)$ y $\gamma_R(\omega)$ mediante una función de tipo Lorentziana, cumpliendo las condiciones $\gamma_L(\epsilon) = \gamma_R(\epsilon + U) = 1/100$ y $\gamma_L(\epsilon + U) = \gamma_R(\epsilon) = 1/600$, 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.7 de las funciones correlación. La estimación de τ_{Bf} se realiza identificando el punto donde la función correlación 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 .

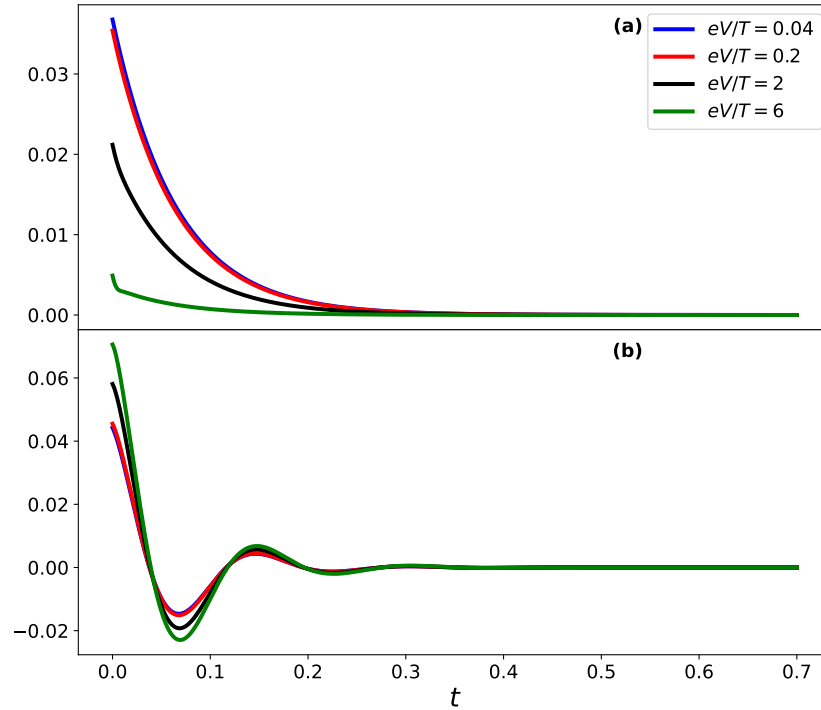


Figura C.2: (a) Parte real de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño L en función del tiempo. (b) Parte real de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño R en función del tiempo.

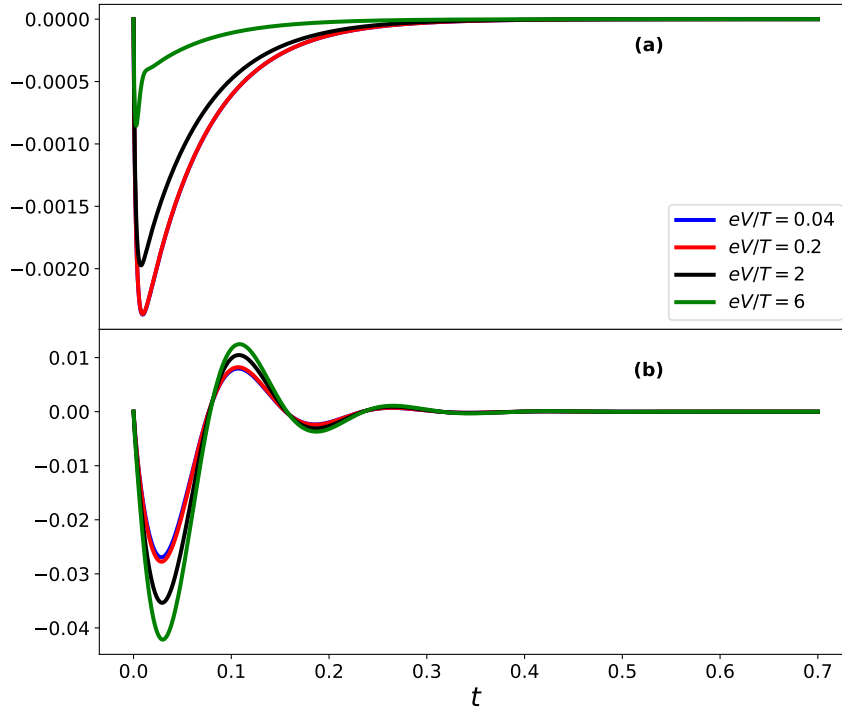


Figura C.3: (a) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño L en función del tiempo. (b) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = -$ del baño R en función del tiempo.

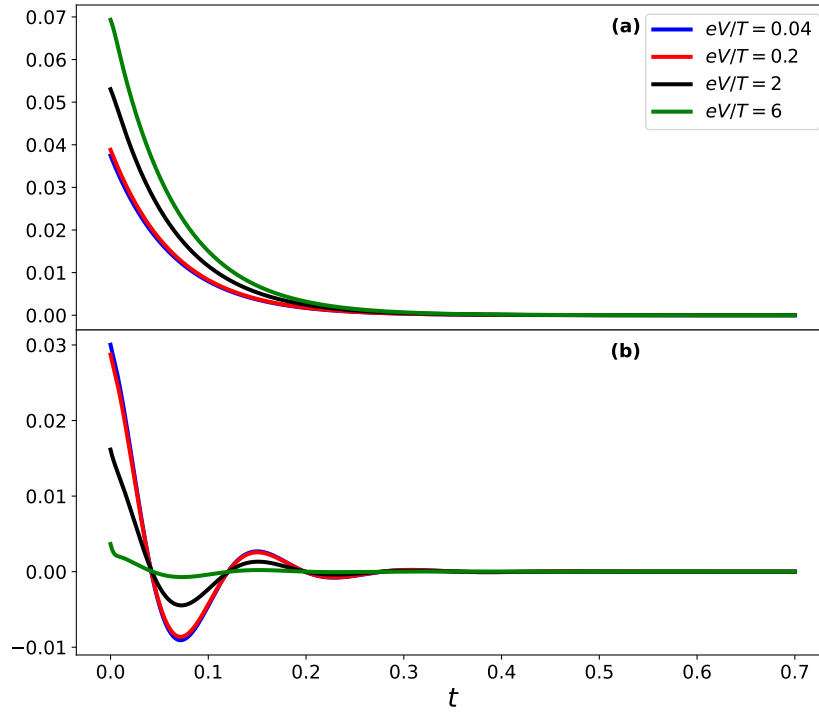


Figura C.4: (a) Parte real de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño L en función del tiempo. (b) Parte real de las funciones correlación $\sigma = +$ del baño R en función del tiempo.

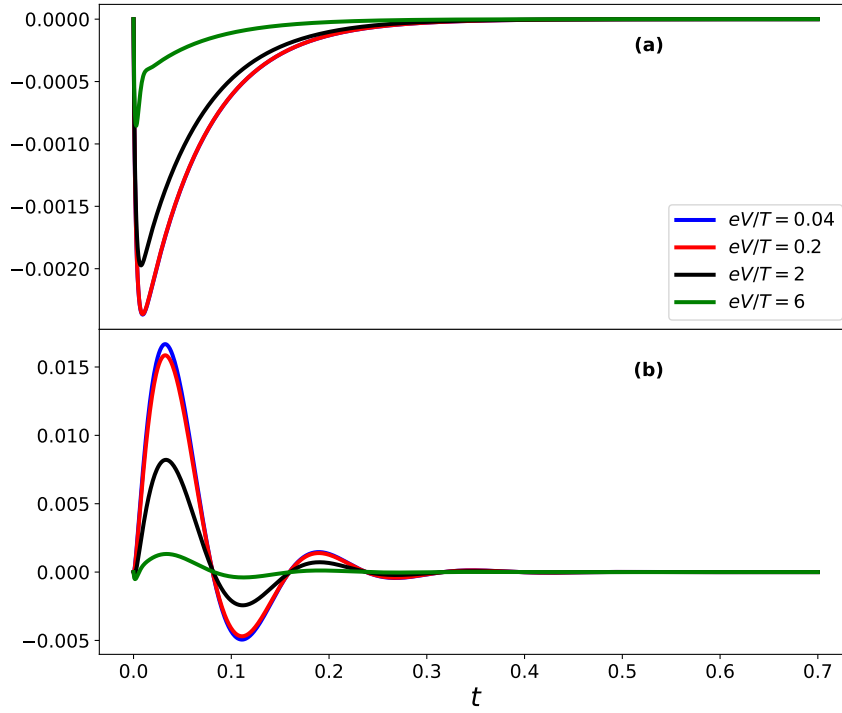


Figura C.5: (a) Parte imaginaria de las funciones correlación $\sigma = +$ del bao L en funcin del tiempo. (b) Parte imaginaria de las funciones correlacin $\sigma = +$ del bao R en funcin del tiempo.

A partir de las Figuras C.2, C.3, C.4 y C.5, se observa que, para $t > 0.4$, las funciones de correlacin correspondientes a ambos baos se anulan prcticamente.

Para analizar el carcter markoviano del sistema, se puede comparar este tiempo de correlacin con la dinmica de relajacin de la matriz densidad hacia el estado estacionario. Para ello, en la Figura C.6 se grafica la evolucin temporal de las componentes de la matriz densidad y se analiza el tiempo caracterstico en que estas alcanzan su rgimen estacionario.

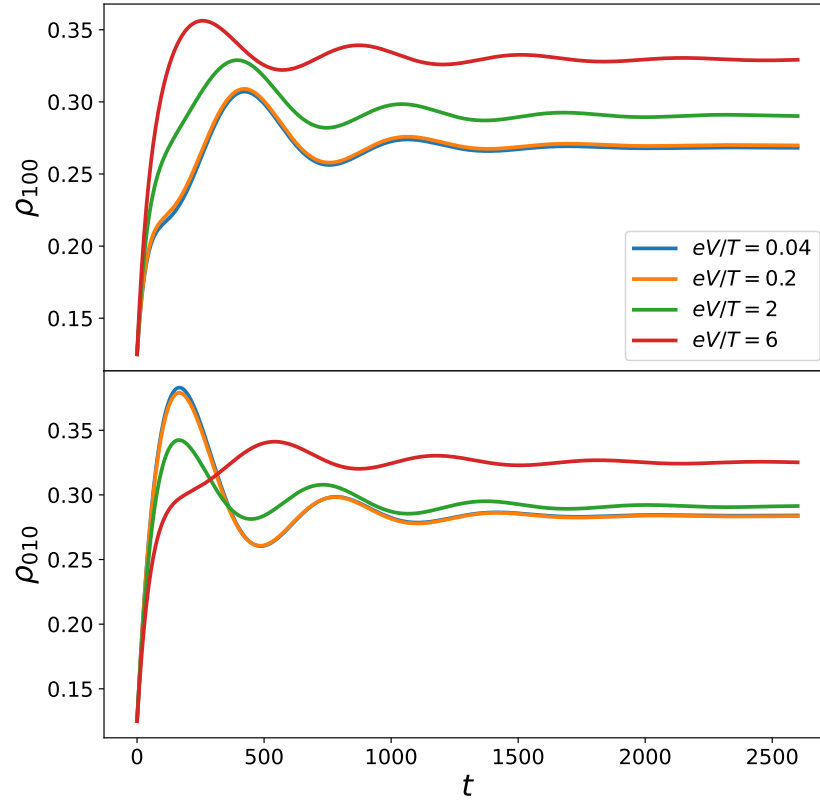


Figura C.6: Componentes ρ_{100} y ρ_{010} de la matriz densidad en función del tiempo, para distintos valores de eV/T .

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.7. 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

$$\hat{\rho}_S = \begin{bmatrix} \rho_{000} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{100} & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^* & \rho_{010} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{001} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{110} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{101} & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^* & \rho_{011} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{111} \end{bmatrix}. \quad (\text{C.8})$$

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 [52, 53]. 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

$$B = \hat{\rho}_{LR} \tilde{\rho}_{LR} \quad \tilde{\rho}_{LR} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \hat{\rho}_{LR} (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (\text{C.9})$$

en la cual σ_y pertenece a las matrices de Pauli. Al aplicar C.9 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.8. 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

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

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

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

luego, se define el operador

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

y queda la ecuación

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

Esto se puede reinsertar en la ecuación principal, obteniéndose así

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{G}}(t, 0)\check{\mathcal{Q}}|\hat{\rho}(0)\rangle\rangle + \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{L}}_f\int_0^t \check{\mathcal{G}}(t, \tau)\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_f\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(\tau)\rangle\rangle d\tau. \quad (\text{C.10})$$

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.10 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.10, 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.10. 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 γ_i , es decir, $g \ll \gamma_i$, 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 γ_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 $1/\gamma_i$ 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

$$\frac{d}{dt}\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle = (\check{\mathcal{L}}_0 - \check{\mathcal{P}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{L}}_0^{-1}\check{\mathcal{Q}}\check{\mathcal{V}}\check{\mathcal{P}})\check{\mathcal{P}}|\hat{\rho}(t)\rangle\rangle.$$

C.9. 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.10. 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.8, 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

$$\begin{aligned}
\dot{I}_L &= \gamma_L(\epsilon)(f_L(\epsilon)[a_0\rho_{000} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_L(\epsilon))[\rho_{100} \ln \rho_{000} - a_0\rho_{100}]) \\
&+ \gamma_L(\epsilon + U)(f_L(\epsilon + U)[a_1\rho_{001} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_L(\epsilon + U))[\rho_{101} \ln \rho_{001} - a_1\rho_{101} - \text{Re}(b_1^*\beta)]) \\
&+ \gamma_L(\epsilon + U_f)(f_L(\epsilon + U_f)[\rho_{010} \ln \rho_{110} - b_0\rho_{010} - \text{Re}(\alpha c_0^*)] + (1 - f_L(\epsilon + U_f))[b_0\rho_{110} - \rho_{110} \ln \rho_{110}]) \\
&+ \gamma_L(\epsilon + U + U_f)(f_L(\epsilon + U + U_f)[\rho_{011} \ln \rho_{111} - b_1\rho_{011}] + (1 - f_L(\epsilon + U + U_f))[b_1\rho_{111} - \rho_{111} \ln \rho_{111}]) \\
\dot{I}_R &= \gamma_R(\epsilon)(f_L(\epsilon)[b_0\rho_{000} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_R(\epsilon))[\rho_{010} \ln \rho_{000} - b_0\rho_{010}]) \\
&+ \gamma_R(\epsilon + U)(f_R(\epsilon + U)[b_1\rho_{001} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_R(\epsilon + U))[\rho_{011} \ln \rho_{001} - a_1\rho_{011} - \text{Re}(b_1^*\beta)]) \\
&+ \gamma_R(\epsilon + U_f)(f_R(\epsilon + U_f)[\rho_{100} \ln \rho_{110} - a_0\rho_{100} - \text{Re}(\alpha c_0^*)] + (1 - f_R(\epsilon + U_f))[a_0\rho_{110} - \rho_{110} \ln \rho_{110}]) \\
&+ \gamma_R(\epsilon + U + U_f)(f_R(\epsilon + U + U_f)[\rho_{101} \ln \rho_{111} - a_1\rho_{101}] + (1 - f_R(\epsilon + U + U_f))[a_1\rho_{111} - \rho_{111} \ln \rho_{111}]).
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\lim_{\alpha, \beta \rightarrow 0} \dot{I}_L = \dot{I}_{Lclassic} = & \gamma_L(\epsilon)(f_L(\epsilon)[\rho_{000} \ln \rho_{100} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_L(\epsilon))[\rho_{100} \ln \rho_{000} - \rho_{100} \ln \rho_{100}]) \\
& + \gamma_L(\epsilon + U)(f_L(\epsilon + U)[\rho_{001} \ln \rho_{101} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_L(\epsilon + U))[\rho_{101} \ln \rho_{001} - \rho_{101} \ln \rho_{101}]) \\
& + \gamma_L(\epsilon + U_f)(f_L(\epsilon + U_f)[\rho_{010} \ln \rho_{110} - \rho_{010} \ln \rho_{010}] + (1 - f_L(\epsilon + U_f))[\rho_{110} \ln \rho_{010} - \rho_{110} \ln \rho_{110}]) \\
& + \gamma_L(\epsilon + U + U_f)(f_L(\epsilon + U + U_f)[\rho_{011} \ln \rho_{111} - \rho_{011} \ln \rho_{011}]) \\
& + \gamma_L(\epsilon + U + U_f)((1 - f_L(\epsilon + U + U_f))[\rho_{111} \ln \rho_{011} - \rho_{111} \ln \rho_{111}])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{\alpha, \beta \rightarrow 0} \dot{I}_R = \dot{I}_{Rclassic} = & \gamma_R(\epsilon)(f_R(\epsilon)[\rho_{000} \ln \rho_{010} - \rho_{000} \ln \rho_{000}] + (1 - f_R(\epsilon))[\rho_{010} \ln \rho_{000} - \rho_{010} \ln \rho_{010}]) \\
& + \gamma_R(\epsilon + U)(f_R(\epsilon + U)[\rho_{001} \ln \rho_{011} - \rho_{001} \ln \rho_{001}] + (1 - f_R(\epsilon + U))[\rho_{011} \ln \rho_{001} - \rho_{011} \ln \rho_{011}]) \\
& + \gamma_R(\epsilon + U_f)(f_R(\epsilon + U_f)[\rho_{100} \ln \rho_{110} - \rho_{100} \ln \rho_{100}] + (1 - f_R(\epsilon + U_f))[\rho_{110} \ln \rho_{100} - \rho_{110} \ln \rho_{110}]) \\
& + \gamma_R(\epsilon + U + U_f)(f_R(\epsilon + U + U_f)[\rho_{101} \ln \rho_{111} - \rho_{101} \ln \rho_{101}]) \\
& + \gamma_R(\epsilon + U + U_f)((1 - f_R(\epsilon + U + U_f))[\rho_{111} \ln \rho_{101} - \rho_{111} \ln \rho_{111}]).
\end{aligned}$$