



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

DISIPACIÓN EN UN SISTEMA CUÁNTICO CONTROLADO A TRAVÉS DE UN PARÁMETRO DEPENDIENTE DEL TIEMPO

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

JOSU ANDONI ARMENDARIZ LAGOS

PROFESOR GUÍA:
FELIPE BARRA DE LA GUARDA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
LUIS FOÀ TORRES
ENRIQUE MUÑOZ TAVERA
ÁLVARO NUÑEZ VÁSQUEZ

SANTIAGO DE CHILE

2018

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR
AL TÍTULO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS, MENCIÓN FÍSICA
POR: JOSU ANDONI ARMENDARIZ LAGOS
FECHA: 2018
PROF. GUÍA: FELIPE BARRA DE LA GUARDA

DISIPACIÓN EN UN SISTEMA CUÁNTICO CONTROLADO A TRAVÉS DE UN PARÁMETRO DEPENDIENTE DEL TIEMPO

En esta tesis se usan las herramientas proporcionadas por la termodinámica estocástica y el método de segunda cuantización para estudiar un sistema cuántico cuya dinámica está siendo controlada por un parámetro externo. El modelo considerado consiste en un punto cuántico, cuya energía varía linealmente con el tiempo, que interactúa con un baño formado por una serie de puntos cuánticos cuyas energías se mantienen constantes. La interacción da lugar a brechas de energías que serán llamadas cruces. Para calcular la probabilidad de ocupación del punto se utilizará la fórmula de Landau-Zener. Una vez hecho esto se procede a calcular la producción de entropía del sistema para el caso de un cruce. Este modelo ya ha sido estudiado anteriormente, pero describiendo su dinámica de manera estocástica, ignorando así los efectos cuánticos.

Los resultados principales de esta tesis son dos. En primer lugar, se obtiene una expresión explícita para la producción de entropía considerando que el sistema no tiene coherencias. Esta fórmula se grafica para dos valores distintos de la probabilidad de transición de Landau-Zener (denotada como R): $R = 0,2$ y $R = 0,8$. En ambos casos las curvas obtenidas coinciden con las calculadas en el caso estocástico. En segundo lugar, se estudia el caso en que el sistema sí presenta coherencias. En este caso no logramos obtener una fórmula general para la producción de entropía. La dinámica del sistema se describe a través del modelo impulso-adiabático, el cual considera que la variación de las energías de los niveles lejos del cruce es lenta y que la variación no adiabática del sistema se produce solamente en un punto. Luego de considerar esto, se calcula la producción de entropía y finalmente se llegan a establecer cotas para los valores que esta puede llegar a tomar.

*Wish me luck
no bad luck
no good luck
just wish me luck
in my cold discovery
that you are gone*

Smog, Cold Discovery

El inconveniente de una moral estoica, a la cual me siento inclinado, es que nos condena a una irremisible pasividad frente a los acontecimientos. La ventaja es que nos permite soportar fríamente los pequeños y grandes golpes de la vida. Cada vez que me ha sobrevenido una desgracia he pensado, como Epicteto, que estoy representando un papel y que esa pequeña desdicha que me conmueve era un incidente previsto en la función. Esta reflexión me permite desdoblarme, enfrentarme a la vida no como persona sino como personaje y ver en lo que podría ser un drama una interesante comedia. Esta actitud requiere cierta sangre fría, cierto coraje, pero ¡cuánto más humano y más hermoso es rebelarse, protestar, querer mudar de destino!

*Julio Ramón Ribeyro,
La tentación del fracaso*

Tengo muy pocos principios o convicciones firmes, pero sí creo que debemos tratar bien a los que tenemos cerca y en que todas las personas tienen derecho a momentos de placer, alegría o como se llame: debemos tratar de no amargar a nadie.

Hebe Uhart, Primera persona

Agradecimientos

Agradezco a mis padres, mis hermanos, mi sobrino y mi cuñado por su apoyo y su cariño constante. Su comprensión me ha hecho sentir que siempre he tenido un cobijo disponible.

Agradezco a mis amigos, en particular a parte de la generación perdida y al consejo de ancianos (Byron, Eva, Pancho, Jano, Jotapel, Jose, Nico, Pesce, Breva, Guille, JG, Pelo y otros que probablemente olvide), por ser una fuente recurrente de sabiduría y entendimiento. Ser parte de este consejo me ha permitido tener una formación intelectual y ética mediante el cuestionamiento de mis creencias y mi comportamiento.

Agradezco a mi profesor guía por su entendimiento de la carga emocional que presentó para mí el proceso de la tesis. Fue una gran ayuda para poder terminar.

Agradezco a la gente que hace posible el funcionamiento de Sci-Hub y Library Genesis (долгой копирайт в науке). Su batalla por lograr un acceso público al conocimiento ha jugado un rol importantísimo en la continuación de la investigación actual.

Tabla de Contenido

Introducción	1
1. Marco teórico	3
1.1. Termodinámica y termodinámica estocástica	3
1.2. Entropía relativa	5
1.3. Termodinámica estocástica	6
1.3.1. Termodinámica de ensembles	7
1.4. Segunda cuantización	10
1.4.1. Espacio de Fock	13
2. Producción de entropía como correlaciones entre sistema y baño	15
2.1. Configuración	15
2.2. La producción de entropía tiene un valor real	17
2.3. Primera ley	17
3. Disipación en sistemas pequeños: un modelo estocástico	19
3.1. Modelo	19
3.1.1. Posibles escenarios experimentales	19
3.1.2. Descripción del sistema a través de cantidades de 1 partícula	21
3.2. Dinámica estocástica	22
3.3. Termodinámica	23
4. Descripción cuántica sin coherencias y correspondencia con el modelo estocástico	24
4.1. El modelo: Hamiltoniano	24
4.2. Una forma explícita para la producción de entropía	25
4.3. Producción de entropía	26
4.3.1. Matriz densidad sin coherencias de Fock	26
4.3.2. Ocupación del punto y del baño	27
4.3.3. Caso sin coherencias	28
5. Producción de entropía con coherencias de Fock	31
5.1. Coherencias de Fock	31
5.2. Producción de entropía	32
5.2.1. Valores propios	34
5.3. Producción de entropía en el Régimen de Landau-Zener	35

Conclusión	36
Bibliografía	37
A. Prueba de la Ec. (4.21)	40
B. Transición de Landau-Zener	42
B.1. Modelo impulso-adiabático	43
B.1.1. Evolución adiabática	44
B.1.2. Transición no adiabática	45
B.2. Hamiltoniano modificado	49
B.2.1. Transición no adiabática para el Hamiltoniano modificado	51
B.2.2. Transformación para un nivel del baño arbitrario	52

Introducción

Además de su éxito empírico, la termodinámica en equilibrio ha llegado a tener gran importancia porque es una teoría que puede ser resumida en principios o leyes generales desde los cuales se pueden derivar varios resultados que pueden ser aplicados en contextos diversos sin importar los elementos constituyentes del sistema al cual se aplica la teoría, es decir, la forma de estas teorías va desde lo más general a lo más particular. Einstein llamó a este tipo de teorías “teorías de principios”, distinguiéndolas de las “teorías constructivistas”, que parten desde ciertos detalles de los fenómenos (por ejemplo, la forma de las interacciones de las partículas que componen al sistema estudiado) y desde ellos se empiezan a construir resultados más generales, como es el caso de la teoría cinética de los gases [12]. La característica antes mencionada de la termodinámica en equilibrio no es compartida por la termodinámica fuera del equilibrio, lo cual no quiere decir que en esta teoría no haya ningún tipo de principios que puedan caracterizar una cantidad extensa de fenómenos. Esta tesis aborda una rama de la termodinámica fuera del equilibrio llamada termodinámica estocástica ([7], [22]), que tiene como elementos centrales los teoremas de fluctuaciones. Estos teoremas comienzan a ser cruciales al momento de estudiar sistemas pequeños, donde las fluctuaciones en torno a un valor promedio de las cantidades termodinámicas del sistema se vuelven importantes. Estos teoremas de fluctuación permiten relacionar distribuciones de cantidades fuera del equilibrio con cantidades definidas en procesos en equilibrio, como, por ejemplo, la distribución de trabajo con la energía libre [15].

En esta tesis se abordará un modelo de disipación de sistemas pequeños y se comparará la dinámica del sistema estudiado de forma estocástica con la dinámica cuántica. La disipación está asociada con la producción de entropía y como se trata de un sistema pequeño, será necesario usar algunos resultados de termodinámica estocástica. Para hacer esto será necesario comenzar haciendo un recuento general de los métodos usados, por lo cual en el **capítulo 2** se parte con un breve repaso de termodinámica. Luego, se introducen los métodos termodinámicos estocásticos para estudiar la disipación. Finalmente, se presenta el formalismo de segunda cuantización para describir la dinámica del sistema con muchas partículas. En el **capítulo 3** se establece la conexión entre disipación y producción de entropía modelando la interacción entre sistemas pequeños con un medio, el cual es usualmente conocido como baño térmico. Esta descripción es válida para sistemas cuánticos. En el **capítulo 4** se introduce ya el modelo específico que se estudia en esta tesis. Este modelo describe un sistema que es controlado a través de un parámetro externo y que va interactuando con una serie de sistemas a medida que el parámetro varía. Las bandas de energías de este modelo tienen la forma de cruces de Landau-Zener y su dinámica se describe de manera estocástica. En los siguientes capítulos se usa el formalismo de segunda cuantización para describir el modelo

anterior. En el **capítulo 5** se considera el sistema sin coherencias. Se deriva una fórmula que conecta la dinámica con la producción de entropía y por lo tanto con la disipación del sistema. Esta fórmula se grafica usando distintos valores iniciales del sistema y se compara con los resultados obtenidos en el caso estocástico. Con esto se determina que bajo las condiciones consideradas en este capítulo la descripción estocástica permite obtener una buena aproximación de los valores de la producción de entropía del sistema. En el **capítulo 6** se consideran las coherencias del sistema y se obtienen restricciones para los valores que puede tomar la producción de entropía. El **capítulo 7** finaliza con algunas conclusiones y algunos detalles a considerar para futuros cálculos.

Capítulo 1

Marco teórico

1.1. Termodinámica y termodinámica estocástica

Para comenzar, se hará un repaso muy rápido de termodinámica. Lo que servirá para esta tesis será recordar que la primera ley de la termodinámica establece la conservación de la energía y que se escribe de la siguiente forma

$$\Delta E = W + Q \quad (1.1)$$

y para cambios pequeños

$$dE = dW + dQ \quad (1.2)$$

donde d corresponde a un diferencial inexacto.

Antes de pasar a la segunda ley será bueno recordar también la relación de Gibbs

$$dE = TdS - pdV + \mu dN \quad (1.3)$$

Para procesos reversibles se puede escribir $dW = -pdV + \mu dN$ y $dQ = TdS$.

Ahora se definirá un baño térmico como un sistema termodinámico idealizado que es descrito por una única variable de estado: su energía. Este sistema mantiene su equilibrio aunque esté intercambiando energía con su medio en forma de calor, ya que su tiempo de relajación es lo suficientemente rápido como para considerar que sus cambios son cuasi-estáticos y reversibles, por lo que para un baño térmico se puede escribir la relación de Clausius

$$dS_b = dE_b/T = dQ_b/T \quad (1.4)$$

Para un baño térmico y de partículas, la energía tiene un componente de calor y otro de trabajo químico, entonces $dE_b = TdS_b + \mu dN_b = dQ_b + dW_{b,qco}$ y el cambio de entropía está

dado por

$$dS_b = dQ_b/T = (dE_b - \mu dN_b)/T \quad (1.5)$$

Para un sistema con una entropía S en contacto con un único baño térmico con temperatura T , entropía S_b y potencial químico μ , la segunda ley de la termodinámica se puede escribir de la siguiente manera

$$\Delta S_{tot} = \Delta S + \Delta S_b = \Delta S - Q/T \geq 0 \quad (1.6)$$

$$\Delta S \geq -\Delta S_b = Q/T \quad (1.7)$$

Donde $\Delta S_b = Q_b/T$ y además se consideró que Q es el calor que entra al sistema y por lo tanto $Q_b = -Q$ es el calor que entra al baño.

Ahora se escribe la ec. (1.6) en términos del flujo de entropía ($\Delta_e S$) y la producción de entropía ($\Delta_i S$)

$$\Delta S = -\Delta S_b + \Delta S_{tot} = \Delta_e S + \Delta_i S \quad (1.8)$$

Se identificará $\Delta_i S$ con el cambio total de entropía ΔS_{tot} , por lo cual $\Delta_i S \geq 0$, es decir, la segunda ley vale para la producción de entropía.

Se estudiará el trabajo requerido para ir de un estado de equilibrio a otro de un sistema en contacto con un baño. Para esto es útil introducir la función de estado conocida como energía libre $F = E - TS$. Como el sistema está en contacto con un sólo baño térmico, la temperatura inicial del sistema es la misma que su temperatura final (T), entonces $\Delta F = \Delta E - T\Delta S$. Escribiendo la primera ley como $\Delta E = Q + W = T\Delta_e S + W$ y usando la forma de la segunda ley expuesta en la 1.8, entonces

$$\Delta F = T\Delta_e S + W - T(\Delta_e S + \Delta_i S) = W - T\Delta_i S \quad (1.9)$$

Entonces la segunda ley toma la forma

$$T\Delta_i S = W - \Delta F \geq 0 \quad (1.10)$$

Lo cual quiere decir que el trabajo mínimo necesario para realizar la transición entre 2 estados de equilibrio es el cambio de energía libre del sistema.

Antes de pasar a describir los principios de termodinámica estocástica será bueno considerar un ejemplo típico de termodinámica: un gas en una caja que se mantiene en contacto con un baño térmico a temperatura constante T y una pared móvil con la cual se puede comprimir el gas.

Llamamos *protocolo* a la forma en que cambia el parámetro externo $\lambda(t)$ desde un valor inicial λ_0 hasta un valor λ_τ durante un período de tiempo $0 \leq t \leq \tau$. En este caso el parámetro externo es la distancia que se mueve la pared. Este proceso requiere un trabajo W .

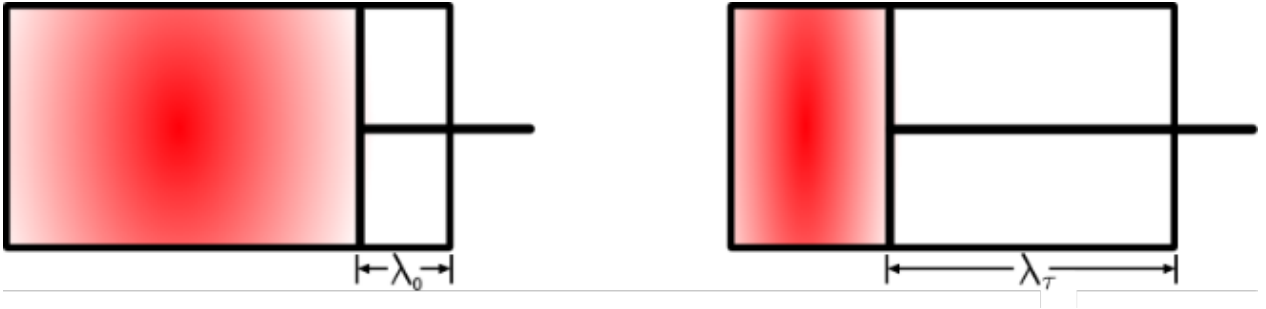


Figura 1.1: Gas en una caja que se mantiene en contacto a un baño térmico a temperatura T

1.2. Entropía relativa

Se considera un sistema cuántico cuyo hamiltoniano H_t es controlado arbitrariamente por un parámetro externo durante un intervalo finito τ [6]. El sistema estará acoplado débilmente a un baño térmico. El cambio de energía del proceso será $\Delta E = E_\tau - E_0$ y el cambio de entropía $\Delta S = S_\tau - S_0$. La primera ley y el balance de entropía tomarán la siguiente forma

$$\Delta E = \langle W \rangle + \langle Q \rangle \quad (1.11)$$

$$\Delta S = \beta \langle Q \rangle + \langle S_i \rangle \quad (1.12)$$

donde $\langle \bullet \rangle$ indica el valor promedio calculado en el ensemble canónico de la cantidad correspondiente. La razón por la cual aparece este promedio es porque se trabajará con sistemas pequeños cuyas cantidades termodinámicas podrán ser definidas de manera que al tomar un promedio de ellas se reobtengan las cantidades macrocópicas usadas comúnmente en termodinámica.

Usando la ec. (1.11) se puede despejar la producción de entropía promedio, $\langle S_i \rangle$

$$\langle S_i \rangle = \Delta S - \beta \Delta E + \beta \langle W \rangle \quad (1.13)$$

Para obtener una expresión microscópica de S_i se describirán los estados del sistema a través del operador densidad ρ_t .

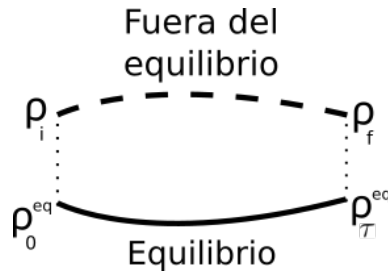


Figura 1.2: Proceso de evolución del sistema descrito por una matriz densidad ρ . No es necesario que los estados inicial y final del sistema sean estados de equilibrio.

Los operadores densidad del estado inicial y el estado final tendrán la forma $\rho_i = \exp(-\beta_i H_0)/Z_i$ y $\rho_f = \exp(-\beta_f H_\tau)/Z_f$, respectivamente. Esto quiere decir que estos estados no necesitan

estar en equilibrio con el baño a temperatura $T = 1/\beta$, pero sí lo están con baños a temperatura $T_i = 1/\beta_i$ para el estado inicial y $T_f = 1/\beta_f$ para el final. Además se definirá el operador en equilibrio instantáneo con respecto al baño como $\rho_t^{\text{eq}} = \exp(\beta H_t)/Z_t$.

La entropía inicial es

$$S_i = -\text{Tr}\rho_i \ln \rho_i \quad (1.14)$$

y la energía inicial multiplicada por β es

$$\beta E_i = \beta \text{Tr}\rho_i H_0 = -\text{Tr}\rho_i \ln \rho_0^{\text{eq}} - \ln Z_0 \quad (1.15)$$

donde $Z_0 = \text{Tr}(\exp(-\beta H_0))$ Análogamente para el estado final se tiene

$$S_f = -\text{Tr}\rho_f \ln \rho_f \quad (1.16)$$

y

$$\beta E_f = \beta \text{Tr}\rho_f H_\tau = -\text{Tr}\rho_f \ln \rho_\tau^{\text{eq}} - \ln Z_\tau \quad (1.17)$$

Se identifica ahora el trabajo promedio realizado durante el proceso con el cambio promedio del Hamiltoniano

$$\begin{aligned} \beta \langle W \rangle &= \beta \int_0^\tau \text{Tr}\rho_t \partial_t H_t dt \\ &= - \int_0^\tau \text{Tr}\rho_t \partial_t \ln \rho_t^{\text{eq}} dt - \ln Z_\tau + \ln Z_0 \end{aligned} \quad (1.18)$$

Reemplazando las ecs. (1.14)-(1.18) en la ec. (1.13) se obtiene

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle &= -\text{Tr}\rho_f \ln \rho_f + \text{Tr}\rho_i \ln \rho_i \\ &\quad + \text{Tr}\rho_f \ln \rho_\tau^{\text{eq}} + \ln Z_\tau - \text{Tr}\rho_i \ln \rho_0^{\text{eq}} - \ln Z_0 \\ &\quad - \int_0^\tau \text{Tr}\rho_t \partial_t \ln \rho_t^{\text{eq}} dt - \ln Z_\tau + \ln Z_0 \\ &= \text{Tr}\{\rho_i \ln \rho_i - \rho_i \ln \rho_0^{\text{eq}}\} \\ &\quad - \text{Tr}\{\rho_f \ln \rho_f - \rho_f \ln \rho_\tau^{\text{eq}}\} \\ &\quad - \int_0^\tau \text{Tr}\rho_t \partial_t \ln \rho_t^{\text{eq}} dt \\ &= S(\rho_i || \rho_0^{\text{eq}}) - S(\rho_f || \rho_\tau^{\text{eq}}) - \int_0^\tau \text{Tr}\rho_t \partial_t \ln \rho_t^{\text{eq}} dt \end{aligned} \quad (1.19)$$

donde $S(\rho || \sigma) = \text{Tr}\{\rho \ln \rho - \rho \ln \sigma\}$ es la entropía relativa entre ρ y σ , también llamada distancia de Kullback-Leibler. Posteriormente se retomará la forma explícita de la producción de entropía.

1.3. Termodinámica estocástica

Esta sección estará basada en [8]. Si se considera ahora un sistema pequeño, por ejemplo, una molécula o una proteína manejada a través de pinzas ópticas, se puede establecer de manera similar al caso del gas en la caja un protocolo que describa, por ejemplo, la elongación de una proteína [22]. Se puede medir el trabajo en cada una de estas trayectorias seguidas, pero como el sistema es pequeño, las fluctuaciones jugarán un rol importante, haciendo que el valor del trabajo cambie de trayectoria en trayectoria.

1.3.1. Termodinámica de ensembles

Se considera un sistema con estados discretos no degenerados en contacto con un baño térmico a temperatura T y un baño de partículas con un potencial químico μ . Los estados se denotan con el subíndice m y tienen una energía ε_m y número de partículas n_m . El sistema además puede intercambiar trabajo con una fuente que controla los niveles de energía del sistema $\varepsilon(\lambda)$ a través de un parámetro de control dependiente del tiempo $\lambda \equiv \lambda(t)$.

La probabilidad de estar en un estado m se describe mediante una distribución P_m y la evolución temporal de este estado es descrita a través de una ecuación maestra Markoviana:

$$d_t P_m = \sum_{m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) = \sum_{m'} J_{m,m'} \quad (1.20)$$

Donde $W_{m,m'}$ es la probabilidad por unidad de tiempo de transición desde el estado m' al estado m y $J_{m,m'}$ es el promedio del número de transiciones por unidad de tiempo desde m' a m .

El sistema llegará a un equilibrio con el baño. La distribución de este estado estacionario está dada por la distribución gran canónica

$$P_m^{eq} = \exp\{-\beta(\varepsilon_m - \mu n_m - \Omega^{eq})\} \quad (1.21)$$

donde $\beta = 1/k_B T$ y Ω^{eq} es el gran potencial en equilibrio que se obtiene al normalizar P^{eq}

$$\exp\{-\beta\Omega^{eq}\} = \sum_m \exp\{-\beta(\varepsilon_m - \mu n_m)\}$$

Junto con lo anterior, se establece la condición de balance detallado para las tasas de transición, esto quiere decir que en equilibrio cada transición de un estado a otro debe ser igualmente probable que la transición inversa:

$$W_{m,m'} P_{m'}^{eq} = W_{m',m} P_m^{eq} \quad (1.22)$$

Si se reemplaza en esta última ecuación la forma de las distribuciones en equilibrio de la ec. (1.20), entonces se obtiene la relación

$$k_B \ln \frac{W_{m',m}}{W_{m,m'}} = \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_{m'} - \mu(n_m - n_{m'})}{T} \equiv \frac{\varepsilon_{m,m'} - \mu n_{m,m'}}{T} \equiv \frac{q_{m,m'}}{T} \quad (1.23)$$

donde se han definido $\varepsilon_{m,m'} = \varepsilon_m - \varepsilon_{m'}$ y $n_{m,m'} = n_m - n_{m'}$ y se ha identificado $q_{m,m'}$ como el calor absorbido por el sistema para hacer la transición del estado m' al estado m . Esta última identificación está justificada porque la ec. (1.23) tiene una forma análoga a la ec. (1.5).

A continuación se introducen las funciones de estado básicas:

$$E = \sum_m \varepsilon_m P_m = \langle \varepsilon_m \rangle \quad (1.24)$$

$$N = \sum_m n_m P_m = \langle n_m \rangle \quad (1.25)$$

$$S = -k_B \sum_m P_m \ln P_m = \langle -k_B \ln P_m \rangle \quad (1.26)$$

Primera ley

Las funciones anteriores pueden cambiar de 2 maneras diferentes: 1) debido a un cambio en P_m , lo cual significa un cambio en la ocupación de los niveles; 2) debido a un cambio en ε_m , lo cual significa un cambio en los niveles de energía. El cambio de energía se escribe

$$d_t E = \sum_m \{ \varepsilon_m d_t P_m + d_t \varepsilon_m P_m \} = \dot{Q} + \dot{W}_{qco} + \dot{W} \quad (1.27)$$

donde se han identificado los distintos componentes de la primera ley:

$$\dot{W} = \sum_m d_t \varepsilon_m P_m = d_t \lambda d_\lambda E \quad (1.28)$$

pues los niveles de energía dependen del parámetro externo λ que a su vez dependel del tiempo, entonces $d_t \varepsilon_m = d_t \lambda d_\lambda \varepsilon_m$.

$$d_t N = \sum_m n_m d_t P_m \quad (1.29)$$

$$\dot{Q} = \sum_m \varepsilon_m d_t P_m - \dot{W}_{qco} \quad (1.30)$$

$$\dot{W}_{qco} = \mu d_t N = \sum_m \mu n_m d_t P_m \quad (1.31)$$

Entonces el cambio de calor se puede escribir como

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= \sum_m (\varepsilon_m - \mu n_m) d_t P_m \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m,m'} (\varepsilon_{m,m'} - \mu n_{m,m'}) J_{m,m'} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_{m,m'} q_{m,m'} \end{aligned} \quad (1.32)$$

En la segunda igualdad de la ec. (1.32) se introdujo un factor 1/2 para contrarrestar la doble suma introducida en los niveles de energía y en el número de partículas.

Segunda ley

Ahora falta tomar la forma de la entropía (1.26) y verificar si se puede obtener una desigualdad análoga a la segunda ley de la termodinámica. Derivando con respecto al tiempo la entropía se obtiene

$$\begin{aligned}
 d_t S &= -k_B \sum_m d_t P_m \ln P_m - k_B \sum_m d_t P_m \\
 &= -k_B \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln P_m - k_B d_t \sum_m P_m \\
 &= -k_B \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln P_m
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

Lo que se busca ahora es reescribir esta expresión de manera tal que puedan identificarse un flujo de entropía y una producción de entropía. Para ello se toma la expresión siguiente

$$\begin{aligned}
 &- 2k_B \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln P_m \\
 &= -k_B \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln P_m - k_B \sum_{m',m} (W_{m',m} P_m - W_{m,m'} P_{m'}) \ln P_{m'} \\
 &= k_B \sum_{m,m'} W_{m,m'} P_{m'} (\ln P_{m'} - \ln P_m) - k_B \sum_{m,m'} W_{m',m} P_m (\ln P_{m'} - \ln P_m) \\
 &= k_B \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln \frac{P_{m'}}{P_m} \\
 &= k_B \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln \frac{P_{m'} W_{m,m'}}{P_m W_{m',m}} \\
 &\quad + k_B \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln \frac{W_{m,m'}}{W_{m',m}}
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned}
 \dot{S} &= \frac{k_B}{2} \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln \frac{W_{m,m'} P_{m'}}{W_{m',m} P_m} \\
 &\quad + \frac{k_B}{2} \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln \frac{W_{m,m'}}{W_{m',m}}
 \end{aligned} \tag{1.35}$$

Entonces se puede identificar el segundo término como el flujo de entropía

$$\begin{aligned}
 \dot{S}_e &= \frac{k_B}{2} \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln \frac{W_{m,m'}}{W_{m',m}} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_{m,m'} \frac{q_{m,m'}}{T} = \frac{\dot{Q}}{T}
 \end{aligned} \tag{1.36}$$

donde se ha identificado la expresión (1.23) para el calor y el promedio del número de transiciones por unidad de tiempo desde m' a m como $J_{m,m'}$. Luego, el primer término se identifica como la producción de entropía

$$\begin{aligned}\dot{S}_i &= \frac{k_B}{2} \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln \frac{W_{m,m'} P_{m'}}{W_{m',m} P_m} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_{m,m'} X_{m,m'}\end{aligned}\tag{1.37}$$

donde se ha definido el logaritmo de la razón de la desviación del balance detallado

$$X_{m,m'} = k_B \ln \frac{W_{m,m'} P_{m'}}{W_{m',m} P_m}$$

Usando la desigualdad $-\ln X \geq 1 - X$ en la ec. (1.37), se puede mostrar que

$$\begin{aligned}\dot{S}_i &= \frac{k_B}{2} \sum_{m,m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m) \ln \frac{W_{m,m'} P_{m'}}{W_{m',m} P_m} \\ &= k_B \sum_{m,m',m>m'} W_{m,m'} P_{m'} \ln \frac{W_{m,m'} P_{m'}}{W_{m',m} P_m} \\ &\geq k_B \sum_{m,m',m>m'} W_{m,m'} P_{m'} \left(1 - \frac{W_{m',m} P_m}{W_{m,m'} P_{m'}}\right) \\ &= k_B \sum_{m,m',m>m'} (W_{m,m'} P_{m'} - W_{m',m} P_m)\end{aligned}\tag{1.38}$$

El último término de la ec. (1.38) es cero cuando se cumple la condición de balance detallado (1.22).

1.4. Segunda cuantización

Esta parte está basada en [14].

Al tratar sistemas cuánticos no relativistas conformados por un gran número de partículas resulta útil introducir el método de segunda cuantización. La primera suposición fundamental es que la extensión natural de la función de estado para una partícula, $\psi(\mathbf{r})$ (que es una función de onda en un espacio de 3 dimensiones), es la función de estado para N -partículas $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$, que es una función compleja en un espacio de $3N$ -dimensiones. La segunda suposición fundamental para sistemas de N -partículas es que las partículas idénticas (partículas con la misma masa, carga, spin, etc) son en principio indistinguibles. Entonces desde esta indistinguibilidad se puede establecer que si dos coordenadas en una función de estado para N -partículas se intercambian, se obtiene el mismo estado físico y la función de estado correspondiente puede diferir de la función de estado original en un factor λ . Si las mismas

dos coordenadas se intercambian nuevamente, se obtiene la misma función de estado original, esto es:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = \lambda \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \lambda^2 \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1.39)$$

Se concluye entonces que $\lambda^2 = 1$ y por lo tanto $\lambda = \pm 1$. Entonces sólo 2 tipos de partículas son posibles en mecánica cuántica: los bosones y los fermiones

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = +\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \quad \text{Bosones} \quad (1.40)$$

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = -\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \quad \text{Fermiones} \quad (1.41)$$

Una generalización del intercambio de pares de coordenadas se puede establecer introduciendo el operador de permutación \hat{P} , que genera una permutación arbitraria de los índices

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_{P_1}, \mathbf{r}_{P_2}, \dots, \mathbf{r}_{P_N}) \quad (1.42)$$

donde P_1, \dots, P_N es una permutación de los números $1, \dots, N$. Si se parte de un autovector de la energía $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ sin una simetría definida se pueden obtener las autofunciones completamente simétricas y antisimétricas de la siguiente manera

$$\psi^S(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = A \sum_P \hat{P}\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1.43)$$

$$\psi^A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = B \sum_P (-1)^P \hat{P}\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1.44)$$

donde se suma sobre todas las permutaciones P_1, \dots, P_N de los índices $1, \dots, N$, A y B se pueden obtener por medio de la normalización del estado y el signo $(-1)^P$ está definido por

$$(-1)^P = \begin{cases} +1 & \text{para cantidad par de permutaciones,} \\ -1 & \text{para cantidad impar de permutaciones} \end{cases} \quad (1.45)$$

En los capítulos siguientes de la tesis sólo se trabajará con fermiones, así que de ahora en adelante sólo se tomarán los casos correspondientes a estos.

Considerando un sistema no interactuante, se puede escribir su Hamiltoniano como la suma de operadores de una partícula:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = \sum_{i=1}^N \hat{h}(r_i, p_i) \quad (1.46)$$

Si se resuelve el problema de autovalores del operador $\hat{h}(r_i, p_i)$, $\hat{h}\phi_k(r) = \varepsilon_k \phi_k(r)$, se puede construir la función de onda total desde las funciones $\phi_k(r)$ de una partícula. La autofunción más simple del Hamiltoniano 1.46 es

$$\psi_{k_1, \dots, k_N}^E(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi_{k_i}(r_i) \quad (1.47)$$

Esta función de onda producto puede ser escrita en la notación de Dirac.

$$|k_1, \dots, k_N\rangle = |k_1\rangle \dots |k_N\rangle \quad (1.48)$$

El espacio de Hilbert correspondiente es la suma directa de los espacios de una partícula. Las etiquetas corresponden al número cuántico de los estados ocupados, es decir, la ec. 1.48 significa que la partícula número j está en el estado cuántico k_j . El hermítico conjugado del vector (1.48) se escribe $\langle k_1, \dots, k_N | = \langle k_N | \dots \langle k_1 |$. Estos vectores están ortonormalizados

$$\langle k'_1, \dots, k'_N | k_1, \dots, k_N \rangle = \langle k'_1 | k_1 \rangle \dots \langle k'_N | k_N \rangle = \delta(k'_1 - k_1) \dots \delta(k'_N - k_N) \quad (1.49)$$

y son completos

$$1 = \sum_{k_1 \dots k_N} |k_1 \dots k_N \rangle \langle k_1 \dots k_N | \quad (1.50)$$

Una función de onda arbitraria entonces se puede expandir en términos de $|k_1, \dots, k_N \rangle$. La función de onda (1.47) se puede escribir

$$\psi_{k_1, \dots, k_N}^E(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \langle r_1, \dots, r_N | k_1, \dots, k_N \rangle = \langle r_1 | k_1 \rangle \dots \langle r_N | k_N \rangle = \phi_{k_1}(r_1) \dots \phi_{k_N}(r_N) \quad (1.51)$$

El Hamiltoniano (1.46) conmuta con el operador de permutación, entonces se pueden construir autofunciones con una simetría definida, entonces la función de onda antisimetrizada se puede escribir

$$\psi_{k_1, \dots, k_N}^{A,E}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} \phi_{k_1}(r_1) \dots \phi_{k_N}(r_N) \quad (1.52)$$

En la notación de Dirac, las autofunciones antisimetrizadas se pueden escribir

$$|k_1, \dots, k_N \rangle^A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} |k_1, \dots, k_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P |k_{P_1}, \dots, k_{P_N} \rangle \quad (1.53)$$

Entonces la autofunción antisimetrizada es

$$\psi_{k_1, \dots, k_N}^A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle r_1, \dots, r_N | k_1, \dots, k_N \rangle^A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} \phi_{k_1}(r_1) \dots \phi_{k_N}(r_N) \quad (1.54)$$

La antisimetrización de los estados tiene consecuencias para las posibles cantidades observables del sistema. Todos los observables \hat{O} de un sistema de partículas indistinguibles tienen que ser invariantes con respecto a un cambio en la enumeración de las partículas:

$$[\hat{O}, \hat{P}] = 0 \quad (1.55)$$

Entonces los elementos matriciales antisimetrizados de un observable arbitrario pueden ser calculados a través del producto entre la matriz y los estados antisimetrizados descritos

anteriormente:

$$\begin{aligned}
& A \langle k'_1, \dots, k'_N | \hat{O} | k_1, \dots, k_N \rangle^A \\
&= \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \sum_{P'} (-1)^{P'} \langle k'_{P'_1}, \dots, k'_{P'_N} | \hat{O} | k_{P_1}, \dots, k_{P_N} \rangle \\
&= \sum_P (-1)^P \langle k'_1, \dots, k'_N | \hat{O} | k_{P_1}, \dots, k_{P_N} \rangle
\end{aligned} \tag{1.56}$$

donde la última igualdad viene de fijar los valores para las permutaciones P' y multiplicar por el total de estas, es decir, $N!$. El cálculo de la traza de los operadores sigue la misma línea

$$\text{Tr } \hat{O} = \frac{1}{N!} \sum_{k_1, \dots, k_N} A \langle k_1, \dots, k_N | \hat{O} | k_1, \dots, k_N \rangle^A \tag{1.57}$$

Considérese ahora la base generada por las autofunciones del operador del número de partículas $\hat{n}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = n_i | \dots, n_i, \dots \rangle$, donde el autovalor n_i corresponde al número de partículas en el estado i . Hay que notar que para el caso de los fermiones, para cualquier j se cumple que $n_j = 0, 1$ debido al principio de exclusión. El operador para el número total de partículas será $\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i$. Aplicando este operador a los estados $| \dots, n_i, \dots \rangle$ se obtiene

$$\hat{N} | n_1, n_2, \dots \rangle = \sum_i n_i | n_1, n_2, \dots \rangle \tag{1.58}$$

El Hamiltoniano se puede escribir como $H = \sum_i \hat{n}_i \varepsilon_i$ y aplicándolo a los estados del número de partículas se obtiene

$$\hat{H} | n_1, n_2, \dots \rangle = \sum_i n_i \varepsilon_i | n_1, n_2, \dots \rangle \tag{1.59}$$

1.4.1. Espacio de Fock

Finalmente se considera que el número total de partículas $\sum_j n_j = N$ es variable. Esto se hace tomando el espacio generado por la suma directa de los espacios para diferente número de partículas. El caso de $N = 0$ corresponde al estado vacío $|0\rangle$, luego el caso $N=1$ donde hay 1 partículas y así sucesivamente, lo cual será denotado como $\mathcal{F} = \mathbb{C} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \dots \mathcal{H}^{(L+1)}$, donde \mathcal{H}^n corresponde al espacio de Hilbert para n partículas. El espacio F que se genera a través de esta suma directa se conoce como **espacio de Fock**. Para moverse entre un espacio de N partículas a uno de $N + 1$ o $N - 1$ se introducen los operadores de creación y destrucción

$$c_j^\dagger | \dots, n_j, \dots \rangle = \sqrt{n_j + 1} | \dots, n_j + 1, \dots \rangle \tag{1.60}$$

$$c_j | \dots, n_j, \dots \rangle = \sqrt{n_j} | \dots, n_j - 1, \dots \rangle \tag{1.61}$$

De esta forma un estado cualquiera $|n_1, n_2, \dots\rangle$ puede ser escrito a través de los operadores de creación desde el estado vacío

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \tag{1.62}$$

Estos operadores cumplen la siguiente relación de anticonmutación:

$$\{c_i, c_j\} = 0, \quad \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0, \quad \{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij} \mathbb{1} \quad (1.63)$$

donde δ_{ij} es una delta de Kronecker y $\mathbb{1}$ es el operador identidad.

Los estados $|k_1, \dots, k_N\rangle$ pueden ser entonces escritos desde el estado vacío de la forma

$$|k_1, k_2, \dots, k_N\rangle^A = c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger \dots c_{k_N}^\dagger |0\rangle \quad (1.64)$$

donde la antisimetría del estado $|k_1, k_2, \dots, k_N\rangle^A$ viene de la antisimetría de los operadores de creación y destrucción.

Entonces, reemplazando la ec. (1.64) en la ec. (1.57), la traza de un operador en un espacio de Fock se escribe

$$\text{Tr } \hat{O} = \sum_N \frac{1}{N!} \sum_{k_1, \dots, k_N} \langle 0 | c_{k_1}, c_{k_2}, \dots, c_{k_N} | \hat{O} | c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger \dots c_{k_N}^\dagger | 0 \rangle \quad (1.65)$$

La fórmula de la ec. (1.65) será importante en los capítulos siguientes al momento de calcular la probabilidad de ocupación de los niveles del sistema que se estudiará. Este sistema se considerará como un sistema cuántico y estará formado por muchas partículas, de ahí la importancia de dejar claro el origen de la forma de la traza.

Capítulo 2

Producción de entropía como correlaciones entre sistema y baño

2.1. Configuración

Se considera un sistema cuántico finito en contacto con uno o más baños térmicos también finitos [11]. Un baño b cualquiera inicialmente tiene una distribución gran canónica

$$\rho_b(0) = \rho_b^{\text{eq}} = \exp\{-\beta_b(H_b - \mu_b N_b)\}/Z_b \quad (2.1)$$

donde $\beta_b = 1/k_B T_b$, con k_B la constante de Boltzmann y T_b la temperatura del baño en $t = 0$, μ_b es su potencial químico, N_b corresponde al número de partículas, H_b es su Hamiltoniano y $Z_b = \text{Tr}[\exp\{-\beta_b(H_b - \mu_b N_b)\}]$ es su función partición en $t = 0$. Inicialmente la matriz densidad del sistema es $\rho_s(0)$ y además el sistema y el baño no tienen correlación, entonces la matriz densidad total es

$$\rho(0) = \rho_s(0)\Pi_b\rho_b^{\text{eq}} \quad (2.2)$$

donde Π_b es una multiplicación sobre todas la matrices densidad de los baños.

Las correlaciones aparecen cuando la matriz densidad total evoluciona en el tiempo. Esta evolución obedece la ecuación de Liouville para el Hamiltoniano total.

El Hamiltoniano del sistema es $H_s(t)$ y la interacción entre el sistema y el baño es $V(t)$. Se considera que el Hamiltoniano del baño no depende del tiempo, entonces el Hamiltoniano total es

$$H(t) = H_s(t) + H_b + V(t) \quad (2.3)$$

Debido a que se busca describir el comportamiento irreversible del sistema, se estudia el comportamiento de su entropía. Se usará la entropía de Shannon

$$S(t) \equiv -\text{Tr}_s \rho_s(t) \ln \rho_s(t) \quad (2.4)$$

donde $\rho_s(t)$ corresponde a la traza de $\rho(t)$ sobre los grados de libertad del baño. La matriz densidad total tiene una evolución unitaria y por el teorema de Liouville la entropía del

universo compuesto por el sistema y el baño es constante. En cambio, la matriz densidad del sistema no tiene una evolución unitaria, así que su entropía sí depende del tiempo.

Usando

$$-\text{Tr}\rho(t)\ln\rho(t) = -\text{Tr}\rho(0)\ln\rho(0) = -\text{Tr}_s\rho_s(0)\ln\rho_s(0) - \sum_b \text{Tr}_b\rho_b^{\text{eq}}\ln\rho_b^{\text{eq}} \quad (2.5)$$

y

$$-\text{Tr}_s\rho_s(t)\ln\rho_s(t) = -\text{Tr}_s\text{Tr}_b\rho(t)\ln\rho_s(t) = -\text{Tr}\rho(t)\ln\rho_s(t) \quad (2.6)$$

se obtiene que el cambio de entropía del sistema es

$$\begin{aligned} \Delta S(t) &= S(t) - S(0) = -\text{Tr}\rho(t)\ln\rho_s(t) + \text{Tr}\rho(t)\ln\rho(t) - \sum_b \text{Tr}_b\rho_b^{\text{eq}}\ln\rho_b^{\text{eq}} \\ &= -\text{Tr}\rho(t)\ln[\rho_s(t)\Pi_b\rho_b^{\text{eq}}] + \text{Tr}\rho(t)\ln\rho(t) + \sum_b \text{Tr}_b[\rho_b(t) - \rho_b^{\text{eq}}]\ln\rho_b^{\text{eq}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Desarrollando además el último término de la ecuación (2.7), se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_b \text{Tr}_b[\rho_b(t) - \rho_b^{\text{eq}}]\ln\rho_b^{\text{eq}} &= \sum_b \text{Tr}_b[\rho_b(t) - \rho_b^{\text{eq}}](-\beta_b(H_b - \mu_b N_b) - \ln Z_b) \\ &= \sum_b \beta_b[\langle H_b \rangle_0 - \mu_b \langle N_b \rangle_0 - (\langle H_b \rangle_t - \mu_b \langle N_b \rangle_t)] \\ &= \sum_b \beta_b[\langle H_b \rangle_0 - \langle H_b \rangle_t - \mu_b(\langle N_b \rangle_0 - \langle N_b \rangle_t)] \\ &= -\sum_b \beta Q_b(t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde $Q_b(t) \equiv \langle H_b \rangle_t - \langle H_b \rangle_0 - W_{qco}(t) \equiv \langle H_b \rangle_t - \langle H_b \rangle_0 - \mu_b(\langle N_b \rangle_t + \langle N_b \rangle_0)$ y $\langle \bullet \rangle \equiv \text{Tr}[\rho(t)\bullet]$. Además se usó que $\langle Z_b \rangle_t = \langle Z_b \rangle_0$.

Entonces se puede identificar la contribución reversible de la entropía con

$$\Delta_e S(t) = -\sum_b \beta Q_b(t) = \sum_b \text{Tr}_b[\rho_b(t) - \rho_b^{\text{eq}}]\ln\rho_b^{\text{eq}} \quad (2.9)$$

y la contribución irreversible con el resto de la ecuación (2.7)

$$\Delta_i S(t) \equiv D[\rho(t)||\rho_s(t)\Pi_b\rho_b^{\text{eq}}] \quad (2.10)$$

donde $D[\rho||\rho'] \equiv \text{Tr}\rho\ln\rho - \text{Tr}\rho\ln\rho'$

Por lo tanto, ahora se puede escribir el cambio de entropía del sistema como una suma de una contribución irreversible y una contribución reversible

$$\Delta S(t) = \Delta_i S(t) + \Delta_e S(t) \quad (2.11)$$

2.2. La producción de entropía tiene un valor real

Es necesario que la forma de la producción de entropía de la ec. (2.10) sea real para que sea una cantidad física. Para probar esto, primero hay que escribir la fórmula de la siguiente manera:

$$\Delta_i S = D(\rho_{total} || \rho_S \otimes \rho_B) = \text{Tr} \rho_{tot} \ln \rho_{tot} - \text{Tr} \rho_{tot} \ln(\rho_S \otimes \rho_B^{eq}) \quad (2.12)$$

Tanto la matriz densidad total, ρ_{tot} , como la matriz densidad del sistema, ρ_S cumplen con ser hermíticas, es decir, $\rho_{tot} = \rho_{tot}^\dagger$. Por esta razón sus valores propios son reales. Entonces se puede diagonalizar ρ_{tot} y escribir el término $\text{Tr} \rho_{tot} \ln \rho_{tot}$ como

$$\text{Tr} \rho_{tot} \ln \rho_{tot} = \sum_i \lambda_i \ln \lambda_i \quad (2.13)$$

con λ_i los valores propios de ρ_{tot} . Esto se puede hacer porque al diagonalizar ρ_{tot} , también se diagonaliza $\ln \rho_{tot}$.

El término $\text{Tr} \rho_{tot} \ln(\rho_S \otimes \rho_B^{eq})$ se puede escribir como

$$\text{Tr} \rho_{tot} \ln(\rho_S \otimes \rho_B^{eq}) = \text{Tr} \rho_S \ln \rho_S + \text{Tr} \rho_{tot} \ln \rho_B \quad (2.14)$$

ya que $\ln \rho_S \otimes \rho_B = \ln \rho_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes \ln \rho_B$. El término $\text{tr} \rho_S \ln \rho_S$ puede escribirse de una manera análoga a la que se escribió $\text{Tr} \rho_{tot} \ln \rho_{tot}$, ya que ρ_S también es hermítica. Se puede probar que el término $\text{Tr} \rho_{tot} \ln \rho_B$ es real recordando que el logaritmo de una matriz es una función real, por lo cual puede escribirse como una serie de potencias con coeficientes reales, esto es, si una función f es real, entonces $f(X) = \sum_n a_n X^n$, con a_n reales. Entonces si X es un operador hermítico, $f^\dagger(X) = \sum a_n (X^n)^\dagger = \sum a_n (X^\dagger)^n = \sum a_n X^n = f(X)$. Con esto se obtiene que $\text{Tr}(\rho_{tot} \ln \rho_B)^\dagger = \text{Tr}(\ln \rho_B)^\dagger \rho_{tot}^\dagger = \text{Tr}(\ln \rho_B \rho_{tot}) = \text{Tr}(\rho_{tot} \ln \rho_B)$, donde la última igualdad se debe a que la traza permanece constante ante permutaciones cíclicas de los componentes de su argumento. Finalmente se concluye que la producción de entropía es real, ya que todos sus términos son reales.

2.3. Primera ley

Finalmente se obtiene la forma para la primera ley de la termodinámica a través de los métodos utilizados en [11]. Usando que $\text{Tr} H(t) \dot{\rho}(t) = 0$, el trabajo realizado sobre el sistema se puede escribir como

$$W \equiv \langle H(t) \rangle_t - \langle H(0) \rangle_0 = \int_0^t d\tau \text{Tr}(\dot{H}_s(t) + \dot{V}(t)) \rho(t) \quad (2.15)$$

La igualdad $\text{Tr}(H_s(t) + V(t) \dot{\rho}(t)) = -\text{Tr} H_r \dot{\rho}(t)$ permite escribir el calor como

$$Q(t) = \langle H_r \rangle_0 - \langle H_r \rangle_t = \text{Tr}(H_r \rho(0)) - \text{Tr}(H_r \rho(t)) = \int_0^t d\tau \text{Tr}(H_s(t) + V(t) \dot{\rho}(t)) \quad (2.16)$$

Entonces el cambio de energía del sistema

$$\begin{aligned}
\Delta U(t) &\equiv \langle H_s(t) + V(t) \rangle_t - \langle H_s(0) + V(0) \rangle_0 \\
&= \langle H(t) \rangle_t - \langle H_r \rangle_t - \langle H(0) \rangle_0 + \langle H_r \rangle_0 \\
&= \langle H(t) \rangle_t - \langle H(0) \rangle_0 + \langle H_r \rangle_0 - \langle H_r \rangle_t
\end{aligned} \tag{2.17}$$

puede ser escrito como una suma del trabajo y el calor como fueron escritos en las ecs. (2.15) y (2.16)

$$\Delta U(t) = W(t) + Q(t) \tag{2.18}$$

Definiendo además la energía libre fuera del equilibrio

$$\Delta F(t) \equiv \Delta U(t) - T\Delta S(t) \tag{2.19}$$

se puede reescribir la producción de entropía como

$$\begin{aligned}
\Delta_i S(t) &= \frac{1}{T}(W(t) - \Delta F(t)) = \frac{1}{T}(W(t) - \Delta U(t)) + \Delta S(t) \\
&= \beta(W(t) - \Delta U(t)) + \Delta S(t)
\end{aligned} \tag{2.20}$$

A través de esta última ecuación es fácil ver la conexión con la ec. (1.19). En efecto, la definición del trabajo en la ec. (2.15) es la misma que en la ec. (1.18). Ahora, si se consideran las mismas condiciones iniciales y finales para el operador densidad y la energía del sistema que las usadas en la sección 2.2, entonces se obtendrá la misma fórmula para la producción de entropía. Hay que tener en cuenta que esta equivalencia se podrá lograr solamente en el límite en que el acoplamiento entre el sistema y el baño es débil, es decir, cuando $V(t)$ en la ec. (2.3) es pequeño comparado con los otros términos del Hamiltoniano del sistema.

Capítulo 3

Disipación en sistemas pequeños: un modelo estocástico

3.1. Modelo

El sistema estará compuesto por un nivel fermiónico cuya energía, ε_t , es controlada mediante un parámetro externo. El baño consiste en L niveles fermiónicos inicialmente en equilibrio con energías ε_i ($i = 1, \dots, L$), ocupación termal $f_i \equiv f(\varepsilon_i) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1}$ y espacios entre las energías de los niveles $\Delta\varepsilon_{i+} = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i$. El sistema más el baño tienen el siguiente Hamiltoniano

$$H(t) = \varepsilon_t c^\dagger c + \sum_{i=1}^L \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \gamma \sum_{i=1}^L (c^\dagger c_i + c_i^\dagger c) \quad (3.1)$$

donde $\varepsilon_t = \dot{\varepsilon}t$ es la energía del punto cuántico, c^\dagger y c sus operadores de creación y destrucción respectivamente, $\dot{\varepsilon}$ es una constante y c_i^\dagger y c_i son los operadores de creación y destrucción del nivel con energía ε_i del baño y γ es la energía de interacción entre el punto y cada nivel del baño.

3.1.1. Posibles escenarios experimentales

Antes de continuar con la descripción del modelo, es importante mencionar algunos de los sistemas experimentales en los cuales este modelo podría ser relevante. Si bien no se ha verificado que los cálculos hechos en esta tesis puedan ser aplicados en los experimentos que se nombrarán, existen algunos detalles que hacen pensar que el modelo aquí descrito puede ser adecuado. Uno de los sistemas de 2 niveles más importantes que están siendo estudiados son los qubits superconductores [5]. En [24] y [13] se estudia la evolución adiabática de este tipo de sistemas. Para ello se necesita variar algún parámetro externo a una cierta velocidad. Si el parámetro es variado muy rápidamente entonces la evolución no será adiabática. Esta dinámica se describe a través de las transiciones de Landau-Zener, pero no se incorpora una descripción termodinámica. Por esta razón sería interesante incorporar el estudio de las

cantidades termodinámicas para poder decir si efectivamente el sistema se mantiene lo suficientemente aislado a medida que se hace variar el parámetro externo. Además, recientemente se ha avanzado en la medición experimental de cantidades termodinámicas, como la producción de entropía, en circuitos eléctricos, entre los cuales están los qubits superconductores ([21]). Un modelo genérico para realizar este tipo de estudios se ilustra en la siguiente figura:

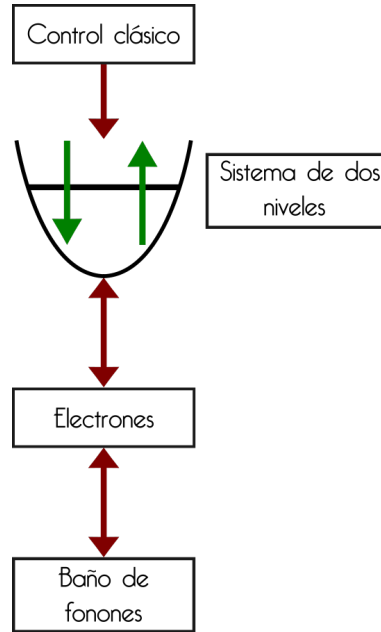


Figura 3.1: Modelo genérico de la disipación y relajación en circuitos electrónicos a bajas temperaturas.

Los electrones que interactúan con el baño de fonones tienen una distribución de Fermi. Para sacar a los electrones del equilibrio se puede aplicar el efecto Joule.

A continuación se describirá un experimento que servirá como ejemplo del modelo genérico de la figura 3.1 y se hará una conexión con las cantidades del sistema descrito por el Hamiltoniano 3.1.

Caja de pares de Cooper

Una caja de pares de Cooper consiste en una isla superconductora acoplada a un reservorio de electrones superconductores mediante una juntura de Josephson. Esta juntura tiene una energía denotada como E_J . Tanto en la isla como en el reservorio hay pares de Cooper que pueden transportarse de un lado a otro cruzando la juntura por efecto túnel. La variable relevante del sistema es el exceso de pares de Cooper que tendrá la isla superconductora. A este número extra de pares de Cooper en la isla se le asocia un estado $|n\rangle$ y una energía de carga E_C . La transferencia de los pares es regulada mediante la aplicación de un voltaje V_g . La fuente de voltaje se conecta al sistema por medio de un capacitor C_g ([19], [3]). El sistema estará conectado a una resistencia R que cumplirá el papel de medio disipativo (fig. 3.2).

Cuando se cumple que $E_J \ll E_C$, el sistema se puede tratar como un estado de 2 niveles descrito por el siguiente Hamiltoniano ([20])

$$\hat{H}(t) = -E_C q(t) [|1\rangle \langle 1| - |0\rangle \langle 0|] - \frac{E_J}{2} [|1\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle 1|] \quad (3.2)$$

donde $q = C_g V_g / (2e)$ es el voltaje normalizado aplicado a la caja y los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ corresponden respectivamente a que la isla tenga 0 y 1 par de Cooper en exceso. El parámetro q es el que tiene una dependencia temporal, que en [20] se considera lineal. Los valores de las cantidades del sistema son los siguientes: $E_J/k_B = 0,1K$, $E_C/k_B = 1K$, temperatura del baño $(k_B\beta)^{-1} = 0,2K$ (revisar [20]). La constante de Boltzmann k_B tiene un valor $1,38064852(79)10^{23}$ en el Sistema Internacional de Unidades.

Considerando sólo un nivel del baño de la ec. (3.1), ε_B , se pueden establecer las siguientes correspondencias con la caja de pares de Cooper: la energía de interacción corresponde a $\gamma = -E_J/2$. La relación entre las energías de los estados de la caja de pares de Cooper y las energías de los estados del sistema de 2 niveles formado por el punto y el nivel del baño dependerá de la forma que tenga el parámetro $q(t)$. Si se considera una forma lineal general $q(t) = at + b$, donde los parámetros a y b no son conocidos, entonces la relación de las energías es la siguiente: $\dot{\varepsilon} = 2aE_C$ y $\varepsilon_B = -2bE_C$.

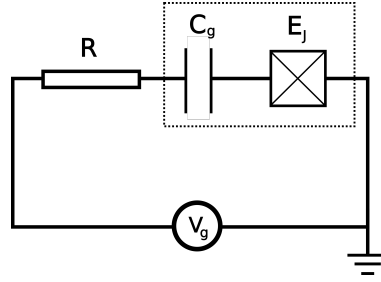


Figura 3.2: Representación del circuito. La caja de pares de Cooper corresponde a la parte encerrada por el rectángulo de líneas punteadas. Figura sacada de [20]

3.1.2. Descripción del sistema a través de cantidades de 1 partícula

Debido a que este sistema está constituido por muchos cuerpos no interactuantes, todas sus propiedades se pueden obtener a partir de las cantidades para un sólo cuerpo. Entonces la dinámica del sistema está dada por una ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo que se puede calcular numéricamente a través del método de Runge-Kutta. Este punto se volverá a abordar en el capítulo siguiente. Resolviendo la ecuación de Schrödinger que se obtiene al usar el Hamiltoniano de un solo cuerpo, se obtienen gráficos para la energía como los que muestra la figura (??). A medida que la energía del punto va variando, se van produciendo brechas de energía cuando se encuentra con los niveles del baño. Estas brechas son producto de la interacción entre el punto y los niveles del baño y tienen un valor $\delta_i = 2\gamma$, donde i indica que el sistema está interactuando con el nivel i del baño. Se asume que el espacio entre los niveles del baño es siempre mayor a las brechas, es decir, $\Delta\varepsilon_{i+} > \delta_i$, lo cual hace posible tratar la interacción del sistema con el baño de manera secuencial y dentro de la teoría de Landau-Zener. La probabilidad de una transición diabática en el cruce i está dada por $R_i = \exp\{-\pi\delta_i^2/2\hbar\dot{\varepsilon}_i\}$.

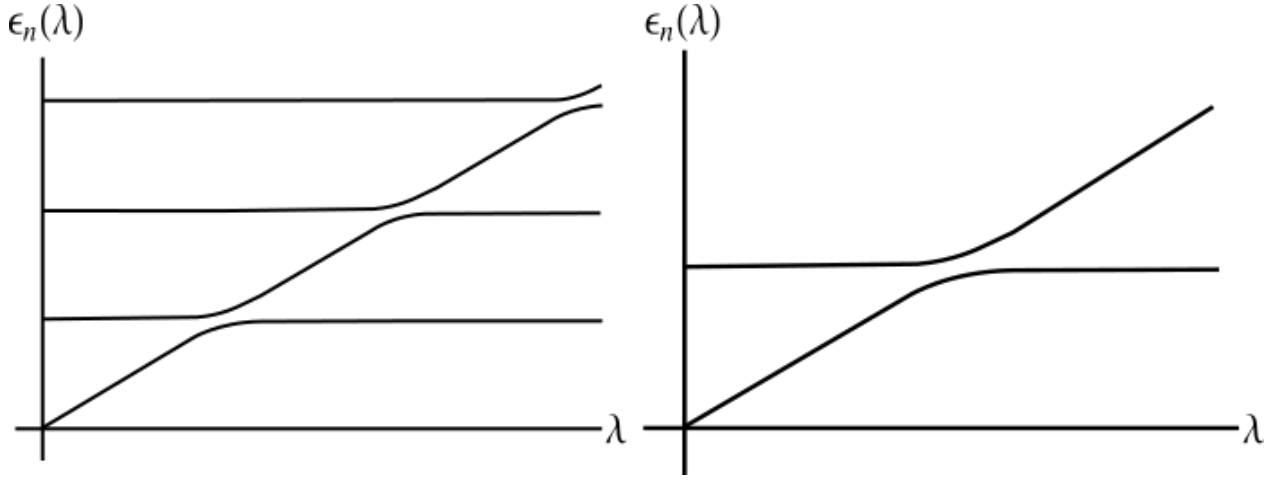


Figura 3.3: Gráfico de la energía del punto y de los niveles del baño en función de un parámetro externo λ . Las brechas que se forman en lugar de los cruces tienen un magnitud $\delta_i = 2\gamma$.

3.2. Dinámica estocástica

A continuación se darán los detalles de la dinámica estocástica. Esta aproximación puede hacerse debido a que el sistema está constituido por fermiones no interactuantes y además porque se considera que el estado del baño cambia cuando el punto cruza con sus niveles y se desprecian las coherencias del sistema. Esto es válido mientras el punto no cruce un mismo nivel del baño más de una vez ([2]). En los capítulos 5 y 6 se estudiará la dinámica cuántica del sistema y se obtendrá la producción de entropía del sistema. Esta cantidad se comparará con lo obtenido en el caso estocástico.

Si se toma un cruce arbitrario i y la probabilidad del sistema justo antes del cruce es p_i , entonces la ocupación del sistema después del cruce es $p_i' = R_i p_i + (1 - R_i) f(\varepsilon_i)$. La evolución de la ocupación del sistema puede ser escrita como una cadena de Markov con probabilidades de transición en el cruce i $M_i^- = (1 - R_i)(1 - f_i)$ para vaciar el nivel del sistema llenando el nivel del baño y $M_i^+ = (1 - R_i) f_i$ para llenar el nivel del sistema vaciando el nivel del baño. Entonces

$$p_{i+1} = (1 - M_i^-) p_i + M_i^+ (1 - p_i) \quad (3.3)$$

Hay que notar dos cosas. Primero, los estados del baño cambian a medida que el nivel del sistema cruza los niveles del baño. Segundo, este modelo estocástico desprecia las coherencias que se generan en la dinámica cuántica. Sin embargo, se espera que este modelo sirva cuando el sistema no cruza los niveles del baño más de una vez. De esta manera una vez que el sistema cruza un nivel, éste no influye posteriormente en la dinámica de aquel.

3.3. Termodinámica

Los valores esperados del número de partículas, la energía interna y la entropía de Shannon del sistema justo antes del cruce con el nivel del baño i están dados respectivamente por

$$\begin{aligned} N_i &= p_i \\ E_i &= \varepsilon_i p_i \\ S_i &= -k_B p_i \ln p_i - k_B (1 - p_i) \ln(1 - p_i) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Entre el cruce i y el cruce $i + 1$ la ocupación del sistema no cambia, así que el número de partículas se mantiene constante. Si el nivel está lleno, la energía cambiará en forma de trabajo mecánico necesario para cambiar la energía del nivel en una cantidad $\Delta\varepsilon_{i+}$. El valor esperado del trabajo, $W_{i+} = W_{i+}^m + W_{i+}^q$ realizado sobre el sistema cuando este va de i a $i + 1$ ($i+$) consiste por una parte en el trabajo mecánico $W_{i+}^m = (\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)p_{i+1}$ generado por la variación del parámetro de control del sistema y por otra parte en el trabajo químico $W_{i+}^q = \mu(p_{i+1} - p_i)$ necesario para transportar partículas desde el baño al sistema. El valor esperado del calor que entra al sistema es

$$Q_{i+} = (\varepsilon_i - \mu)(p_{i+1} - p_i) \quad (3.5)$$

Con estos valores se pueden escribir la primera ley de la termodinámica y el balance de entropía

$$\begin{aligned} \Delta E_{i+} &= E_{i+1} - E_i = W_{i+} + Q_{i+} \\ \Delta S_{i+} &= S_{i+1} - S_i = \Sigma_{i+} + Q_{i+}/T \end{aligned} \quad (3.6)$$

Usando la propiedad del balance detallado local de las tasas de LZ

$$\begin{aligned} \frac{M_i^+}{M_i^-} &= \frac{(1 - R_i)f_i}{(1 - R_i)(1 - f_i)} = \frac{f_i}{1 - f_i} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1} / \left(1 - \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1}\right) \\ &= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1} / \left(\frac{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)}}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1}\right) = e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \end{aligned} \quad (3.7)$$

la producción de entropía se puede escribir como

$$\begin{aligned} \Sigma_{i+} &= k_B M_i^+ (1 - p_i) \ln \frac{M_i^+ (1 - p_i)}{M_i^- p_i} \\ &+ k_B M_i^- p_i \ln \frac{M_i^- p_i}{M_i^+ (1 - p_i)} - k_B D(p_{i+1}|p_i) \geq 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

donde $D(p_{i+1}|p_i) = p_{i+1} \ln \frac{p_{i+1}}{p_i} + (1 - p_{i+1}) \ln \frac{1 - p_{i+1}}{1 - p_i}$ es la entropía relativa.

Esta última fórmula se comparará en el siguiente capítulo con la fórmula de la producción de entropía que se obtenga mediante el modelo cuántico del sistema.

Capítulo 4

Descripción cuántica sin coherencias y correspondencia con el modelo estocástico

4.1. El modelo: Hamiltoniano

En este capítulo se estudia la dinámica de un sistema de partículas no interactuantes cuyo Hamiltoniano es

$$H(t) = \varepsilon_t c_0^\dagger c_0 + \sum_{i=1}^L \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \gamma \sum_{i=1}^L (c_0^\dagger c_i + c_i^\dagger c_0), \quad (4.1)$$

donde $\varepsilon_t = t\hat{\varepsilon}$, con $\hat{\varepsilon}$ constante, es la energía del punto cuántico, c_0^\dagger y c_0 son sus operadores de creación y destrucción. El punto y el nivel ε_i (con operadores de creación y destrucción c_i^\dagger y c_i) están acoplados con una intensidad γ . La dinámica conserva el número de partículas. Debido a que el espacio de Hilbert asociado a una partícula tiene una dimensión finita igual a $L + 1$, el espacio de Hilbert para fermiones no interactuantes es una suma directa de espacios de Hilbert: $\mathcal{F} = \mathbb{C} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \dots \mathcal{H}^{(L+1)}$ donde \mathcal{H}^n es el espacio de Hilbert asociado a n partículas.

La versión de este Hamiltoniano para una partícula es la matriz

$$H_1(t) = \varepsilon_t |\varphi_0\rangle \langle \varphi_0| + \sum_{i=1}^L \varepsilon_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| + \gamma \sum_{i=1}^L (|\varphi_i\rangle \langle \varphi_0| + |\varphi_0\rangle \langle \varphi_i|), \quad (4.2)$$

con $|\varphi_i\rangle$ un vector columna de dimensión $L + 1$ llena de ceros con la excepción de un 1 en la posición $i + 1$ (con $i \in \{0, \dots, L\}$) y $\langle \varphi_i|$ el vector fila. Utilizando este Hamiltoniano se resuelve la ecuación de Schrödinger para cada instante de tiempo t de manera que se obtienen los autovalores y autovectores instantáneos del sistema. El gráfico de energías de este sistema tiene brechas que se producen en los cruces entre la energía del punto y la energía de los niveles del baño. La brecha correspondiente al cruce del punto con el nivel i del baño tiene una magnitud igual al doble de la energía de interacción, $\delta_i = 2\gamma$, tal como muestra la figura (??).

Como es bien sabido, todas las propiedades del sistema de muchos cuerpos en la ec. (4.1) pueden calcularse como la solución de la ec. (4.2). En este capítulo se muestra esto para la probabilidad de que el punto esté ocupado en el tiempo t y se usa para calcular la fórmula de la producción de entropía.

4.2. Una forma explícita para la producción de entropía

Se considera la forma de la producción de entropía expuesta en la sección 3.1:

$$\Delta_i S(t) = D[\rho(t)||\rho_s(t)\rho_r^{eq}] = \text{Tr}\rho(t)\ln\rho(t) - \text{Tr}\rho(t)\ln(\rho_s(t) \otimes \rho_r^{eq}) \quad (4.3)$$

Suponiendo que la matriz densidad inicial es $\rho(0) = \rho_s(0) \otimes \rho_r^{eq}$, donde $\rho_r^{eq} = \frac{e^{-\beta(H-\mu N)}}{\Theta(\beta,\mu)}$, la producción de entropía es:¹

$$\Delta_i S(t) = \Delta S(t) + \Delta S_r(t) \quad (4.4)$$

con

$$\Delta S(t) = \text{Tr}\rho_s(0)\ln\rho_s(0) - \text{Tr}\rho_s(t)\ln\rho_s(t) \quad (4.5)$$

el cambio de entropía del punto y

$$\Delta S_r(t) = \text{Tr}\rho_r^{eq}\ln\rho_r^{eq} - \text{Tr}\rho(t)\ln\rho_r^{eq} \quad (4.6)$$

el cambio de entropía del reservorio.

Debido a que $\ln(\rho_r) = -\beta(H_r - \mu N_r)$, $H_r = \sum_j \varepsilon_j c_j^\dagger c_j$ y $N_r = \sum_j c_j^\dagger c_j$ se llega a:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho_r^{eq}\ln\rho_r^{eq}) &= \text{Tr}(-\beta\rho_r^{eq}(H_r - \mu N_r)) \\ &= -\beta \sum_{j=1}^L \varepsilon_j \text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(0)) - \beta\mu \sum_{j=1}^L \text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(0)) \end{aligned} \quad (4.7)$$

y

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho(t)\ln\rho_r^{eq}) &= \text{Tr}(-\beta\rho(t)(H_r - \mu N_r)) \\ &= -\beta \sum_{j=1}^L \varepsilon_j \text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t)) - \beta\mu \sum_{j=1}^L \text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t)) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Entonces se obtiene una expresión simple para $\Delta S_r(t)$ en términos de la ocupación del baño $n_i(t) = \text{Tr}[c_i^\dagger c_i \rho(t)]$ y $f_i = n_i(0) = \text{Tr}[c_i^\dagger c_i \rho(0)]$,

$$\Delta S_r(t) = -\beta \sum_{i=1}^L (\varepsilon_i - \mu)(f_i - n_i(t)) \quad (4.9)$$

Hay que notar que f_i es la ocupación del nivel i del baño antes del cruce con el punto y $n_i(t)$ es la ocupación de este mismo nivel después del cruce. Entonces se puede realizar el siguiente cálculo: primero, se considera que la probabilidad se conserva en el cruce. Luego, se

¹Se tiene que $\text{Tr}\rho(t)\ln\rho(t) = \text{Tr}\rho(0)\ln\rho(0)$ porque la evolución es unitaria.

denota a la ocupación del punto antes del cruce como p y a la ocupación del punto después del cruce como p' , entonces, debido a la conservación de la probabilidad, se obtiene que $p + f_i = p' + n_i(t)$ o $f_i - n_i(t) = p' - p$. Recordando que el calor que entra al sistema en un cruce es $Q(t) = (\varepsilon_i - f_i)(p' - p)$ (ver ec. (3.5)), entonces el término $\Delta S_r(t)$ de la ec. (4.9) corresponde justamente a $-\beta Q(t)$, es decir, corresponde al flujo negativo de entropía que entra al sistema multiplicado por β .

Ahora falta analizar el primer término de la ec. (4.4), $\Delta S(t)$. Para esto hay que considerar dos situaciones diferentes. Primero, si el estado inicial del punto no tiene coherencias, es decir, $\rho_s(0) = p|1\rangle\langle 1| + (1-p)|0\rangle\langle 0|$ entonces la matriz diagonal del punto permanece diagonal para todo tiempo, es decir $\rho_s(t) = n_0(t)|1\rangle\langle 1| + (1 - n_0(t))|0\rangle\langle 0|$ y

$$\Delta S(t) = p \ln p + (1 - p) \ln(1 - p) - n_0(t) \ln n_0(t) - (1 - n_0(t)) \ln(1 - n_0(t)). \quad (4.10)$$

Además se puede obtener una expresión explícita para la ocupación del punto y para la ocupación del nivel del baño. Esta expresión se usa para evaluar la entropía producida después de un cruce $\Delta_i S$ para sistemas inicialmente sin coherencias. El resultado cuántico completo para este caso es comparado exitosamente con la fórmula estocástica Σ_{i+} en [2].

Para este análisis se usa la fórmula

$$n_j(t) = \text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t)) = p |\langle \varphi_j | U | \varphi_0 \rangle|^2 + \sum_{k=1}^L f(\varepsilon_k) |\langle \varphi_j | U | \varphi_k \rangle|^2 \quad (4.11)$$

que se prueba en el Apéndice II. Es necesario notar que para el nivel del punto $j = 0$, si se considera la evolución U para un tiempo $\approx \Delta\varepsilon/\dot{\varepsilon}$ tal que el punto cruza un nivel (considérese el nivel i), entonces se puede aproximar la probabilidad de permanecer en el punto $|\langle \varphi_0 | U | \varphi_0 \rangle|^2$ por R_i y la probabilidad de transición de saltar desde el nivel k al punto $|\langle \varphi_0 | U | \varphi_k \rangle|^2$ por $\delta_{ki}(1 - R_i)$. De esta manera se recupera la evolución estocástica de [2]

$$n_0(t \approx \Delta\varepsilon/\dot{\varepsilon}) = pR_i + f_i(1 - R_i)$$

La otra situación es que el sistema tiene coherencias inicialmente. Esto se analiza en el capítulo 6.

4.3. Producción de entropía

4.3.1. Matriz densidad sin coherencias de Fock

Para comparar los resultados obtenidos en el caso estocástico hay que concentrarse en un sólo cruce, esto es, considerar el nivel del punto y un sólo nivel del baño. Se calcula la ocupación del punto $n_0(t)$ y la ocupación del baño $n_1(t)$ para t tal que $\dot{\varepsilon}t > \varepsilon_1$, es decir, después del cruce. Se compara la producción de entropía de la ec. (4.10) con Σ_{i+} .

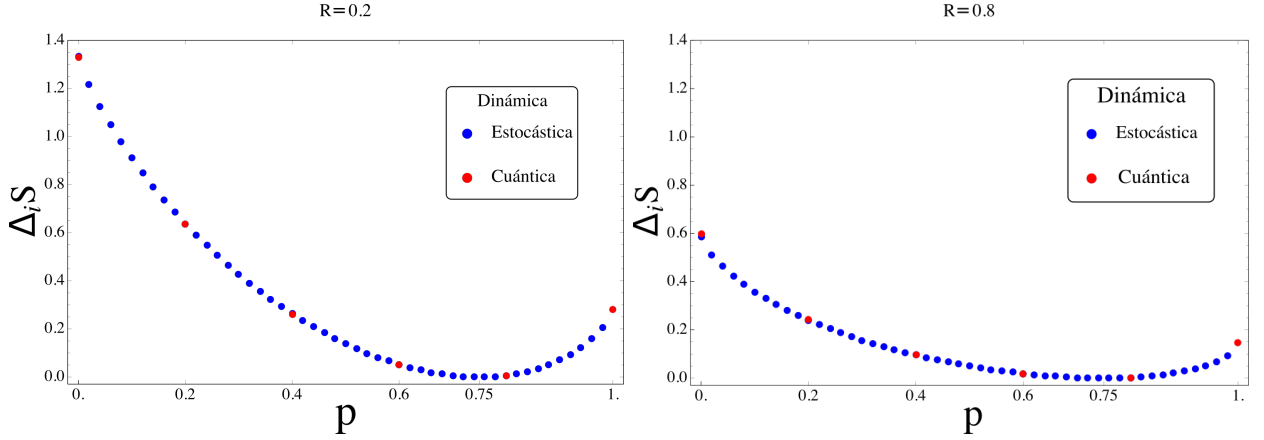


Figura 4.1: Los puntos azules corresponden a la producción de entropía para diferentes valores de la ocupación inicial del nivel del punto obtenido con el modelo estocástico en [2]. Los puntos rojos corresponden a la producción de entropía obtenida con el modelo cuántico sin coherencias. Izquierda: para el caso estocástico se usa $R = 0,2$ y para el caso cuántico se toma $\dot{\epsilon} \approx 0,16$ que corresponde a $R = 0,2$ si se usa la fórmula de Landau-Zener. Derecha: para el caso estocástico se usa $R = 0,8$ y para el caso cuántico se toma $\dot{\epsilon} \approx 1,13$ que corresponde a $R = 0,8$ si se usa la fórmula de Landau-Zener. En ambos casos la ocupación del baño se mantuvo fija y su valor fue $f = 0,75$. Cuando el valor inicial de la ocupación del punto alcanza un valor $p = 0,75$ está en equilibrio con el baño y la producción de entropía se anula.

4.3.2. Ocupación del punto y del baño

Se quiere calcular $n_j(t) = \text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t))$, con $\rho(t) = \mathcal{U} \rho(0) \mathcal{U}^\dagger$ la matriz densidad del sistema de muchos cuerpos en el tiempo t y $j \in \{0, \dots, L\}$, donde $j = 0$ corresponde al punto y $j = 1 \dots L$ a los niveles del baño. El operador de evolución temporal es $\mathcal{U} = \text{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int dt' H(t')}$ y T representa el producto ordenado temporalmente. La traza en el espacio de Fock es

$$\text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t)) = \sum_N \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \langle 0 | c_{\alpha_1} \dots c_{\alpha_N} (c_j^\dagger c_j \rho(t)) c_{\alpha_1}^\dagger \dots c_{\alpha_N}^\dagger | 0 \rangle \quad (4.12)$$

La lista de α s no está ordenada, así que $N!$ está presente porque al sumar sobre el conjunto completo de valores para los α s se repite $N!$ veces cada estado.

Es necesario considerar dos casos para $\langle 0 | c_{\alpha_1} \dots c_{\alpha_N} (c_j^\dagger c_j \rho(t))$. En el primero, ninguno de los $c_{\alpha_i} = c_j$. Entonces se puede anticonmutar c_j^\dagger , moviéndolo hacia la izquierda y aniquilar el estado del vacío: $\langle 0 | c_j^\dagger c_{\alpha_1} \dots = 0$. Así, estos términos no contribuyen. La otra posibilidad es que uno de los $c_{\alpha_i} = c_j$. Entonces se puede dejar $c_j^\dagger c_j$ en frente de aquel operador, es decir, se tiene $c_{\alpha_i} c_j^\dagger c_j = c_j c_j^\dagger c_j = c_j = c_{\alpha_i}$. De esta manera se ha probado que la Ec (4.12) puede ser escrita como

$$\text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t)) = \sum_N \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^{j'} \langle 0 | c_{\alpha_1} \dots c_{\alpha_N} (\rho(t)) c_{\alpha_1}^\dagger \dots c_{\alpha_N}^\dagger | 0 \rangle \quad (4.13)$$

con $\sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^{j'}$ la suma sobre todas las listas $c_{\alpha_1} \dots c_{\alpha_N}$ que contienen a c_j como uno de sus

elementos. Hay N “posiciones” en la lista para el nivel j (nivel del punto o del baño), y como se dijo, permutar los elementos de la lista no cambia el estado. Así, en lo que sigue se fijará α_1 como el nivel j ($c_{\alpha_1} = c_j$) y para tomar en cuenta los N estados equivalentes con j en otras posiciones se tiene que multiplicar por N , es decir,

$$\text{tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t)) = \sum_N \frac{1}{(N-1)!} \sum_{\alpha_2 \dots \alpha_N} \langle 0 | c_j c_{\alpha_2} \dots c_{\alpha_N} (\rho(t)) c_{\alpha_N}^\dagger \dots c_{\alpha_2}^\dagger c_j^\dagger | 0 \rangle \quad (4.14)$$

4.3.3. Caso sin coherencias

Usando la notación de las poblaciones para los estados de muchos cuerpos $|n_0, n_1, \dots, n_L\rangle$ la matriz densidad inicial para el punto es una mezcla donde el punto está ocupado con probabilidad p ,

$$\rho_s(0) = p |1\rangle \langle 1| + (1-p) |0\rangle \langle 0| = p c_0^\dagger |0\rangle \langle 0| c_0 + (1-p) |0\rangle \langle 0| \quad (4.15)$$

y los niveles del baño tienen una distribución gran canónica

$$\frac{e^{-\beta(H-\mu N)}}{\Theta(\mu, \beta)} = \sum_{\{n_i\}} \frac{e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i (\epsilon_i - \mu)}}{\Theta(\mu, \beta)} |n_1, \dots, n_L\rangle \langle n_1, \dots, n_L|$$

Así que la matriz densidad total inicial es

$$\begin{aligned} \rho(0) = & \sum_{\{n_i\}} \frac{e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i (\epsilon_i - \mu)}}{\Theta(\mu, \beta)} (p |1, n_1, \dots, n_L\rangle \langle 1, n_1, \dots, n_L| \\ & + (1-p) |0, n_1, \dots, n_L\rangle \langle 0, n_1, \dots, n_L|) \end{aligned} \quad (4.16)$$

La matriz densidad en un tiempo arbitrario $\rho(t) = \mathcal{U} \rho(0) \mathcal{U}^\dagger$ puede ser escrita en términos del operador de evolución para N partículas U^N

$$\begin{aligned} \rho(t) = & \sum_{\{n_i\}} \frac{e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i (\epsilon_i - \mu)}}{\Theta(\mu, \beta)} \left(p U^{(1+\sum_{i=1}^L n_i)} |1, n_1, \dots, n_L\rangle \langle 1, n_1, \dots, n_L| U^{\dagger(1+\sum_{i=1}^L n_i)} + \right. \\ & \left. (1-p) U^{(\sum_{i=1}^L n_i)} |0, n_1, \dots, n_L\rangle \langle 0, n_1, \dots, n_L| U^{\dagger(\sum_{i=1}^L n_i)} \right) \end{aligned} \quad (4.17)$$

o

$$\begin{aligned} \rho(t) = & \sum_N \left(\sum_{\{n_i\}: \sum_{i=1}^L n_i = N-1} \frac{e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i (\epsilon_i - \mu)}}{\Theta(\mu, \beta)} p U^{(N)} |1, n_1, \dots, n_L\rangle \langle 1, n_1, \dots, n_L| U^{\dagger(N)} + \right. \\ & \left. \sum_{\{n_i\}: \sum_{i=1}^L n_i = N} \frac{e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i (\epsilon_i - \mu)}}{\Theta(\mu, \beta)} (1-p) U^{(N)} |0, n_1, \dots, n_L\rangle \langle 0, n_1, \dots, n_L| U^{\dagger(N)} \right) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Considerando que un estado arbitrario de N partículas $|n_0, n_1, \dots, n_L\rangle$ puede ser escrito como $|n_0, n_1, \dots, n_L\rangle = c_{\gamma_1}^\dagger \cdots c_{\gamma_N}^\dagger |0\rangle$ (y la correspondencia es única. Por ejemplo, el estado para $N = 2$ partículas es $|0, 1, 0, \dots, 0, 1\rangle = c_1^\dagger c_L^\dagger |0\rangle$).

Entonces, de acuerdo con la Ec. (4.14), se tienen que evaluar los términos de la forma

$$\begin{aligned} \langle 0 | c_j c_{\alpha_2} \cdots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \cdots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle \langle 0 | c_{\gamma_N} \cdots c_{\gamma_1} U^{\dagger N} c_{\alpha_N}^\dagger \cdots c_{\alpha_2}^\dagger c_j^\dagger | 0 \rangle \\ = |\langle 0 | c_j c_{\alpha_2} \cdots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \cdots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle|^2 \end{aligned} \quad (4.19)$$

Nótese que se considera que en ambos términos, $U^N c_{\gamma_1}^\dagger \cdots c_{\gamma_N}^\dagger |0\rangle$ y $c_{\alpha_N}^\dagger \cdots c_{\alpha_2}^\dagger c_j^\dagger |0\rangle$, se tiene el mismo número N de partículas porque los estados con diferente número de partículas son ortogonales ($\langle N | M \rangle = 0$ si $N \neq M$). Entonces se define

$$G_j(\gamma_1, \dots, \gamma_N) = \sum_{\alpha_2 \cdots \alpha_N} |\langle 0 | c_j c_{\alpha_2} \cdots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \cdots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle|^2$$

y también

$$G_j^{(N)}(n_0, \dots, n_L) \equiv G_j(\gamma_1, \dots, \gamma_N)$$

Entonces,

$$\begin{aligned} \text{tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t)) = \sum_N \frac{1}{(N-1)! \Theta(\mu, \beta)} \left(p \sum_{\{n_i\}: \sum_{i=1}^L n_i = N-1} e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i (\varepsilon_i - \mu)} G_j^{(N)}(1, n_1, \dots, n_L) + \right. \\ \left. (1-p) \sum_{\{n_i\}: \sum_i n_i = N} e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i (\varepsilon_i - \mu)} G_j^{(N)}(0, n_1, \dots, n_L) \right) \end{aligned} \quad (4.20)$$

En el Apéndice A se prueba que

$$G_j^{(N)}(n_0, \dots, n_L) = (N-1)! \sum_{i=0}^L n_i |\langle \varphi_j | U | \varphi_i \rangle|^2. \quad (4.21)$$

De esta forma $(N-1)!$ se cancela.

Se analiza el primer término de la Ec.(4.20), la cual se reescribe como

$$\text{term1} = p \sum_{\{n_i\}} \frac{e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i (\varepsilon_i - \mu)}}{\Theta(\mu, \beta)} (|\langle \varphi_j | U | \varphi_0 \rangle|^2 + \sum_{i=1}^L n_i |\langle \varphi_j | U | \varphi_i \rangle|^2)$$

Usando

$$\frac{e^{-\beta \sum_i n_i (\varepsilon_i - \mu)}}{\Theta(\mu, \beta)} = \prod_{j=1}^L \frac{e^{-\beta n_j (\varepsilon_j - \mu)}}{\zeta_j(\mu, \beta)} \quad (4.22)$$

con $\zeta_j(\mu, \beta) = 1 + e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)}$

$$\text{term1} = p(|\langle \varphi_j | U | \varphi_0 \rangle|^2) + \sum_{\{n_i\}} \prod_{j=1}^L \frac{e^{-\beta n_j(\varepsilon_j - \mu)}}{\zeta_j(\mu, \beta)} \sum_{i=1}^L n_i |\langle \varphi_j | U | \varphi_i \rangle|^2$$

y

$$\sum_{\{n_i\}} \prod_{k=1}^L \frac{e^{-\beta n_k(\varepsilon_k - \mu)}}{\zeta_k} n_i = \sum_{n_i=0}^1 \frac{e^{-\beta n_i(\varepsilon_i - \mu)}}{\zeta_i} n_i = f(\varepsilon_i) \quad (4.23)$$

entonces

$$\text{term1} = p(|\langle \varphi_j | U | \varphi_0 \rangle|^2) + \sum_{i=1}^L |\langle \varphi_j | U | \varphi_i \rangle|^2 f(\varepsilon_i)$$

Similarmente el segundo término en la Ec.(4.20) se escribe como

$$\text{term2} = (1 - p) \sum_{\{n_i\}} \frac{e^{-\beta \sum_{i=1}^L n_i(\varepsilon_i - \mu)}}{\Theta(\mu, \beta)} \left(\sum_{i=1}^L n_i |\langle \varphi_j | U | \varphi_i \rangle|^2 \right) = (1 - p) \sum_{i=1}^L |\langle \varphi_j | U | \varphi_i \rangle|^2 f(\varepsilon_i)$$

Finalmente se obtiene

$$\text{Tr}(c_j^\dagger c_j \rho(t)) = p |\langle \varphi_j | U | \varphi_0 \rangle|^2 + \sum_{i=1}^L f(\varepsilon_i) |\langle \varphi_j | U | \varphi_i \rangle|^2 \quad (4.24)$$

A continuación se muestra el gráfico de la ec. (4.24) en función del tiempo.

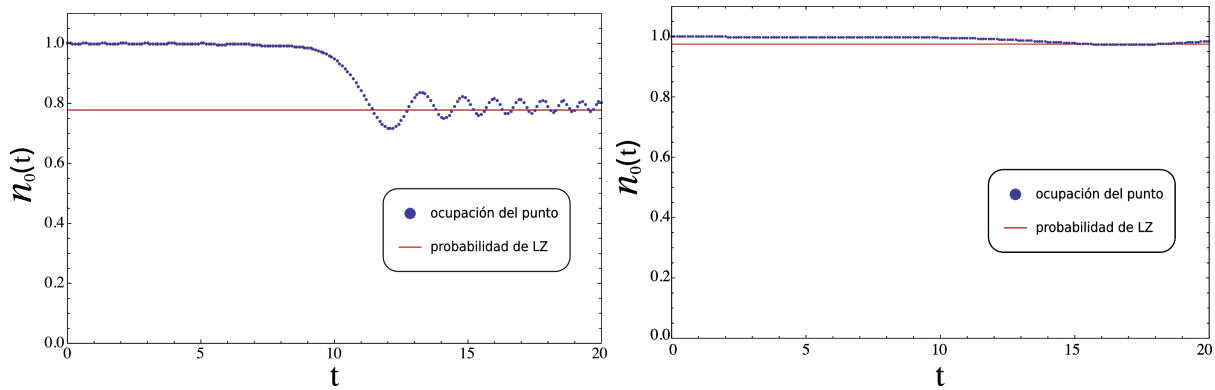


Figura 4.2: La línea azul punteada es la ocupación del punto correspondiente a la ec. (4.24). El operador U de esta ecuación se obtiene para cada instante de tiempo resolviendo la ecuación de Schrödinger a través del método de Runge-Kutta 4. La línea roja es la probabilidad de transición de Landau-Zener, $R = \exp\{-\pi \delta_i^2 / 2 \hbar \dot{\varepsilon}_i\}$. La figura de la izquierda corresponde a $\dot{\varepsilon} = 1$ y la de la derecha a $\dot{\varepsilon} = 10$.

La figura obtenida muestra el comportamiento esperado en una transición de Landau-Zener.

Capítulo 5

Producción de entropía con coherencias de Fock

5.1. Coherencias de Fock

Si la matriz densidad inicial del punto tiene coherencias no nulas, la matriz densidad inicial del punto más el nivel del baño es:

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}(-t_a + T) &= [p|1\rangle_d \langle 1| + (1-p)|0\rangle_d \langle 0| + k|1\rangle \langle 0| + k^*|0\rangle \langle 1|] \otimes [f|1\rangle_b \langle 1| + (1-f)|0\rangle_b \langle 0|] \\
 &= pf|11\rangle \langle 11| + (1-p)f|01\rangle \langle 01| + p(1-f)|10\rangle \langle 10| + (1-f)(1-p)|00\rangle \langle 00| \\
 &\quad + kf|11\rangle \langle 01| + k(1-f)|10\rangle \langle 00| + k^*f|01\rangle \langle 11| + k^*(1-f)|00\rangle \langle 10|
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

La matriz densidad total a un tiempo arbitrario t_a se obtiene aplicándole los operadores de evolución temporal a la matriz densidad inicial:

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}(t_a + T) &= U\hat{\rho}(-t_a + T)U^\dagger = pfU^{(2)}|11\rangle \langle 11|U^{(2)\dagger} + (1-p)fU^{(1)}|01\rangle \langle 01|U^{(1)\dagger} \\
 &\quad + p(1-f)U^{(1)}|10\rangle \langle 10|U^{(1)\dagger} + (1-f)(1-p)U^{(0)}|00\rangle \langle 00|U^{(0)\dagger} \\
 &\quad + fkU^{(2)}|11\rangle \langle 01|U^{(1)\dagger} + (1-f)kU^{(1)}|10\rangle \langle 00|U^{(0)\dagger} \\
 &\quad + fk^*U^{(1)}|01\rangle \langle 11|U^{(2)\dagger} + (1-f)k^*U^{(0)}|00\rangle \langle 10|U^{(1)\dagger}
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

donde $U^{(0)}$, $U^{(1)}$ y $U^{(2)}$ son los operadores de evolución temporal para 0 partículas, 1 partícula y 2 partículas respectivamente. Estos operadores actúan de la siguiente forma sobre los distintos estados del sistema:

$$\begin{aligned}
 U^{(0)}|00\rangle &= |00\rangle \\
 U^{(1)}|10\rangle &= \alpha_1|01\rangle + \beta_1|10\rangle \\
 U^{(1)}|01\rangle &= \alpha_2|10\rangle + \beta_2|01\rangle \\
 U^{(2)}|11\rangle &= \exp\left(-i\int_{-t_a+T}^{t_a+T}(\dot{\epsilon}t + \epsilon_B)dt\right)|11\rangle = \exp(-4i\epsilon_B t_a)|11\rangle
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Si el sistema parte a la izquierda del cruce y muy alejado de éste en un tiempo inicial $t = -t_a + T$ y termina a la derecha del cruce en un tiempo final $t = t_a + T$, entonces $U^{(1)} = L$, con L la matriz calculada en el apéndice B. Siguiendo los cálculos realizados en el apéndice B, se puede identificar $\alpha_1 = M_{11} = \sqrt{1 - R}e^{i\varphi_S}e^{2i\zeta(t_a)}e^{-2i\varepsilon_B t_a}$, $\beta_1 = M_{12} = \sqrt{R}$, $\alpha_2 = -M_{22} = -\sqrt{1 - R}e^{-i\varphi_S}e^{-2i\zeta(t_a)}e^{-2i\varepsilon_B t_a}$ y $\beta_2 = -M_{21} = \sqrt{R}$. Reemplazando las expresiones de 5.3 en 5.2 se obtiene:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t_a + T) = & pf |11\rangle \langle 11| + (1-p)(1-f) |00\rangle \langle 00| \\ & + (1-p)f[|\alpha_2|^2 |10\rangle \langle 10| + \alpha_2\beta_2^* |10\rangle \langle 01| + \alpha_2^*\beta_2 |01\rangle \langle 10| + |\beta_2|^2 |01\rangle \langle 01|] \\ & + (1-f)p[|\alpha_1|^2 |01\rangle \langle 01| + \alpha_1\beta_1^* |01\rangle \langle 10| + \alpha_1^*\beta_1 |10\rangle \langle 01| + |\beta_1|^2 |10\rangle \langle 10|] \\ & + fk \exp(-4i\varepsilon_B t_a)[\alpha_2^* |11\rangle \langle 10| + \beta_2^* |11\rangle \langle 01|] + (1-f)k[\alpha_1 |01\rangle \langle 00| + \beta_1 |10\rangle \langle 00|] \\ & + fk^* \exp(4i\varepsilon_B t_a)[\alpha_2 |10\rangle \langle 11| + \beta_2 |01\rangle \langle 11|] + (1-f)k^*[\alpha_1^* |00\rangle \langle 01| + \beta_1^* |00\rangle \langle 10|] \end{aligned} \quad (5.4)$$

Entonces ahora se tienen términos de la forma $|11\rangle \langle 10|$, $|11\rangle \langle 01|$, $|10\rangle \langle 00|$, $|01\rangle \langle 00|$ y sus transpuestos conjugados. Esto quiere decir que habrán superposiciones de estados de Fock con distinto número de partículas a las cuales se les llamará *coherencias de Fock*.

5.2. Producción de entropía

Con lo anterior se pueden obtener los términos $\rho_S(t_a + T) = \text{Tr}_B \rho(t_a + T)$ y $\rho_B(t_a + T) = \text{Tr}_S \rho(t_a + T)$ para calcular la producción de entropía $\Delta_i S = \Delta S + \Delta_B S = \text{Tr} \rho_S(-t_a + T) \ln \rho_S(-t_a + T) - \text{Tr} \rho_S(t_a + T) \ln \rho_S(t_a + T) + \text{Tr} \rho_B(-t_a + T) \ln \rho_B(-t_a + T) - \text{Tr} \rho_B(t_a + T) \ln \rho_B(t_a + T)$.

Aplicando las trazas parciales sobre $\hat{\rho}(t_a + T)$ se obtiene:

$$\begin{aligned} \rho_S(t_a + T) = \text{Tr}_B \rho(t_a + T) = & [pf + (1-p)f|\alpha_2|^2 + (1-f)p|\beta_1|^2] |1\rangle \langle 1| \\ & + [(1-p)(1-f) + (1-p)f|\beta_2|^2 + (1-f)p|\alpha_1|^2] |0\rangle \langle 0| \\ & + [fk\beta_2^* \exp(-4i\varepsilon_B t_a) + (1-f)k\beta_1] |1\rangle \langle 0| + [fk^*\beta_2 \exp(4i\varepsilon_B t_a) \\ & + (1-f)k^*\beta_1^*] |0\rangle \langle 1| \end{aligned} \quad (5.5)$$

y

$$\begin{aligned} \rho_B(t_a + T) = \text{Tr}_S \rho(t_a + T) = & [pf + (1-p)f|\beta_2|^2 + (1-f)p|\alpha_1|^2] |1\rangle \langle 1| \\ & + [(1-p)(1-f) + (1-p)f|\alpha_2|^2 + (1-f)p|\beta_1|^2] |0\rangle \langle 0| \\ & + [fk\alpha_2^* \exp(-4i\varepsilon_B t_a) + (1-f)k\alpha_1] |1\rangle \langle 0| + [fk^*\alpha_2 \exp(4i\varepsilon_B t_a) \\ & + (1-f)k^*\alpha_1^*] |0\rangle \langle 1| \end{aligned} \quad (5.6)$$

Nótese que $|\alpha_1|^2 = |\alpha_2|^2 = 1 - R$ y $|\beta_1|^2 = |\beta_2|^2 = R$, por lo tanto el término de $\rho_S(t_a + T)$ que acompaña a $|1\rangle \langle 1|$ y que corresponde a la probabilidad de que el punto esté ocupado en un tiempo $t_a + T$ posterior al cruce es

$$p' = pf + (1-p)f(1-R) + (1-f)pR = pR + (1-f)R \quad (5.7)$$

Mientras que los términos no diagonales, es decir, las coherencias, adoptan la forma

$$k' = k(f\beta_2 e^{-i4\varepsilon_n t_a} + (1-f)\beta_1) = k\sqrt{R}(1-f(1-e^{-i4\varepsilon_n t_a})) \quad (5.8)$$

Entonces las coherencias van cambiando sólo mediante la multiplicación de un término complejo nuevo que depende de los valores del nivel del baño que esté cruzando el punto. Ahora se considera una cantidad de cruces l , entonces las coherencias son

$$k^{(l)} = \prod_{j=1}^l \alpha_j k$$

donde $\alpha_j = \sqrt{R_j}(1-f_j(1-e^{-i4\varepsilon_j t_a})) \equiv r_j e^{i\theta_j}$. Para identificar los términos de la representación polar se hace lo siguiente

$$r_j = \sqrt{R_j} \sqrt{(1-f_j)^2 + f_j^2 + 2f_j(1-f_j) \cos(4\varepsilon_j t_a)} \approx \sqrt{R_j} \quad (5.9)$$

y

$$\tan(\theta_j) = \frac{-f_j \sin(4\varepsilon_j t_a)}{1-f_j+f_j \cos(4\varepsilon_j t_a)} \approx -4f_j \varepsilon_j \Delta\varepsilon / |\dot{\varepsilon}| \rightarrow \theta_j \approx 4\varepsilon_j f_j \Delta\varepsilon / |\dot{\varepsilon}| \quad (5.10)$$

Se verá ahora que las coherencias van decayendo a medida que el número de cruces l va aumentando. Para esto basta ver que el módulo de α_j , es decir r_j , es menor a 1. Como R_j es la probabilidad de transición en el cruce del punto con el nivel j ya se sabe que será menor a 1. Entonces hay que verificar que la suma dentro de la segunda raíz que aparece en la ec. (5.9), esto quiere decir que hay que verificar que

$$(1-f_j)^2 + f_j^2 + 2f_j(1-f_j) \cos(4\varepsilon_j t_a) \leq 1 \quad (5.11)$$

Como $\cos(4\varepsilon_j t_a) \leq 1$ entonces

$$(1-f_j)^2 + f_j^2 + 2f_j(1-f_j) \cos(4\varepsilon_j t_a) \leq (1-f_j)^2 + f_j^2 + 2f_j(1-f_j) = (1-f_j+f_j)^2 = 1 \quad (5.12)$$

con lo que se verifica que el módulo de α_i para cualquier i es menor que 1 y por lo tanto las coherencias decaen. Esto último sirve de justificación para la aproximación estocástica de la dinámica del sistema.

Ahora se verá qué pasa en el límite continuo de los niveles del baño. Las aproximaciones hechas en las ecs. (5.9) y (5.10) son válidas porque se toma un tiempo de cruce t_a infinitesimal. Considerando ahora que los niveles del baño están más cerca, durante un tiempo dt la energía cambia como $d\varepsilon = \dot{\varepsilon} dt$ y el número de niveles del baño cruzados por el punto es aproximadamente $n = \nu(\varepsilon_t) d\varepsilon = \dot{\varepsilon} \nu(\varepsilon_t) dt$, donde $\nu(\varepsilon_t)$ es la densidad de estados. Como el intervalo temporal en que ocurren los cruces es corto, entonces la densidad no cambia mucho durante el proceso y puede considerarse constante. Entonces

$$\prod_{j=1}^l \alpha_j = \exp(i \sum_{j=1}^l \theta_j) \exp(\sum_{j=1}^l \ln r_j) \approx \exp\left(\frac{4i}{\dot{\varepsilon}} \int_0^{\dot{\varepsilon} t} d\varepsilon f(\varepsilon) \varepsilon\right) \exp\left(\int_0^t |\dot{\varepsilon}| \bar{d}(\varepsilon_{t'}) \frac{\ln R(\varepsilon_{t'})}{2} dt'\right)$$

donde $R(\varepsilon) \approx 1$ para que la descripción de Landau-Zener sea válida. Esto permite usar la aproximación $\ln R \approx R - 1$ y por lo tanto

$$k(t) \approx k(0) \exp\left(\frac{4i}{\dot{\varepsilon}} \int_0^{\dot{\varepsilon} t} d\varepsilon f(\varepsilon) \varepsilon\right) \exp\left(-\int_0^t |\dot{\varepsilon}| \bar{d}(\varepsilon_{t'}) \frac{1-R(\varepsilon_{t'})}{2} dt'\right)$$

Como $f(\varepsilon)$ decae a medida que la energía crece y R nunca es mayor a 1, entonces las coherencias decaen exponencialmente en el tiempo.

5.2.1. Valores propios

Hay que notar también que k no puede tomar cualquier valor debido a que los valores propios de la matriz densidad son reales y positivos. Entonces si $\rho_S(-t_a + T) = p|1\rangle\langle 1| + (1-p)|0\rangle\langle 0| + k|1\rangle\langle 0| + k^*|0\rangle\langle 1|$ sus valores propios son las soluciones de la siguiente ecuación:

$$\lambda^2 - \lambda + p(1-p) - |k|^2 = 0 \quad (5.13)$$

Entonces

$$\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4[p(1-p) - |k|^2]}}{2} \quad (5.14)$$

Para que los autovalores sean reales es necesario que $1 \geq 4[p(1-p) - |k|^2]$, es decir $p(1-p) - \frac{1}{4} \leq |k|^2$ lo que se cumple siempre pues el lado izquierdo de la desigualdad es negativo.

Imponiendo ahora que los autovalores sean positivos se obtiene $\sqrt{1 - 4[p(1-p) - |k|^2]} < 1$. Es decir,

$$|k|^2 < p(1-p) \quad (5.15)$$

Al evaluar la producción de entropía en la curva $|k| = \sqrt{p(1-p)}$ obtenemos un límite superior para esta indicada con la curva celeste en la figura 5.1. Las otras curvas se obtienen calculando la producción de entropía como función de p para k fijo.

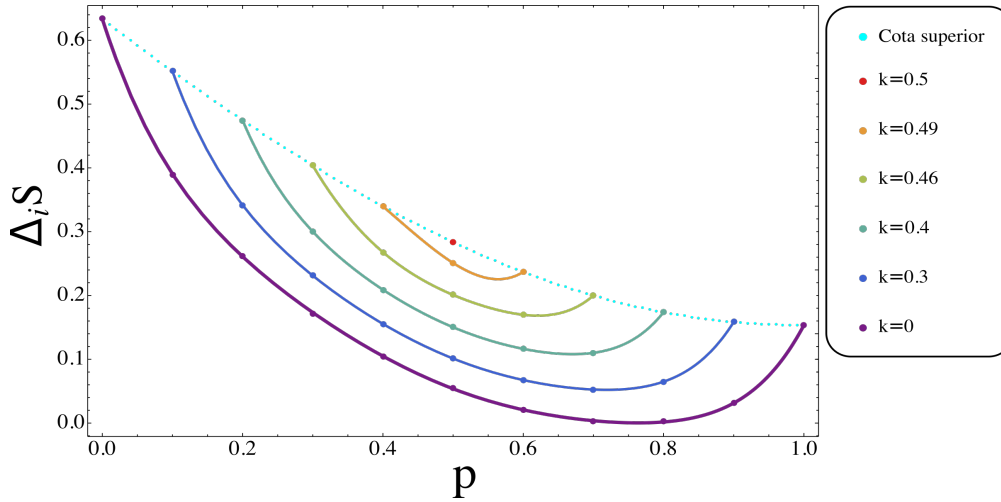


Figura 5.1: Los puntos morados corresponden a un valor $k = 0$; los puntos azules a $k = 0,3$; los puntos verdes a $k = 0,4$; los puntos verde-amarillos a $k = 0,46$; los puntos naranjos a $k = 0,49$ y el punto rojo a $k = 0,5$. La curva celeste corresponde al máximo valor que puede alcanzar la producción de entropía en función de la ocupación inicial del punto. El valor de $\dot{\epsilon}$ es 1 y por lo tanto $R = 0,777$. El valor de la ocupación del nivel del baño se mantuvo fijo y fue $f = 0,75$. La curva morada, correspondiente al caso sin coherencias, alcanza su mínimo cuando $p = 0,75$, es decir, cuando el punto está en equilibrio con el baño.

Comparando los puntos de la figura anterior correspondientes a $k = 0$ con la producción de entropía en el caso estocástico se logra ver que efectivamente si se utiliza el valor $k = 0$, la situación se reduce al caso sin coherencias.

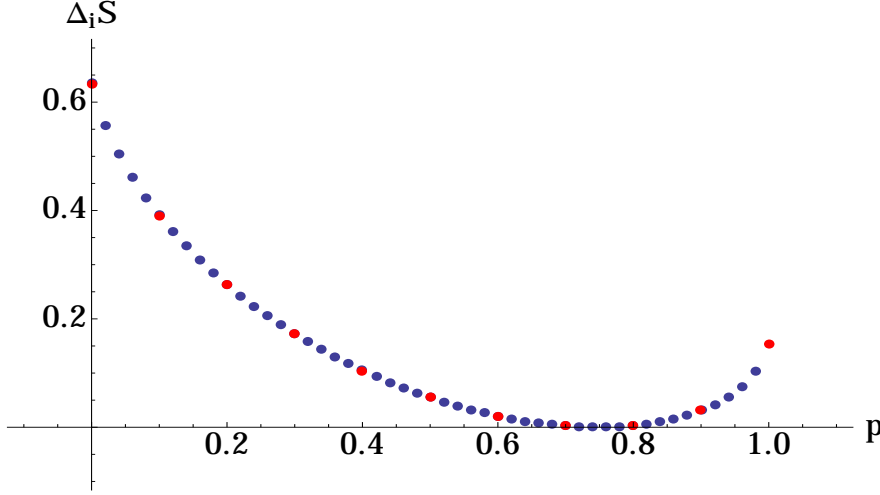


Figura 5.2: Comparación de la producción de entropía entre el caso $k = 0$ con el caso estocástico

5.3. Producción de entropía en el Régimen de Landau-Zener

En la sección anterior se vio cómo calcular la producción de entropía debido al cruce de dos niveles. En el límite de validez del régimen de Landau-Zener, es decir cuando $\gamma \ll \delta\varepsilon$, la evolución del problema de N cuerpos puede aproximarse por una evolución de dos cuerpos, por lo que se puede calcular la producción de entropía después de varios cruces usando los resultados anteriores. En efecto, el siguiente proceso iterativo debería coincidir con la evolución exacta si $\gamma \ll \delta\varepsilon$. Considérese el sistema con la matriz densidad $\rho_S(0)$ y el reservorio en el estado $\rho_B = \Pi_i \rho_{B_i} = \Pi_i [f_i |1\rangle \langle 1| + (1 - f_i) |0\rangle \langle 0|]$. Si entre $t = 0$ y $t = \tau$ se produce el primer cruce entonces es razonable considerar que

$$U_N(0, \tau) \rho_S(0) \otimes \rho_B U_N^\dagger(0, \tau) \approx U_2(0, \tau) \rho_S(0) \otimes \rho_{B_1} U_2^\dagger(0, \tau) \Pi_{i=2} \rho_{B_i}$$

la correlación que se establece entre el sistema y el baño permite calcular la producción de entropía debido al primer cruce. Luego para el segundo cruce, es decir entre τ y 2τ

$$U_N(0, 2\tau) \rho_S(0) \otimes \rho_B U_N^\dagger(0, 2\tau) \approx U_3(\tau, 2\tau) U_2(0, \tau) \rho_S(0) \otimes \rho_{B_1} U_2(0, \tau)^\dagger \rho_{B_2} U_3(\tau, 2\tau)^\dagger \Pi_{i=3} \rho_{B_i}$$

donde se ha supuesto nuevamente que la evolución está principalmente determinada por la dinámica de a lo más dos cuerpos que ocurre entre el nivel 2 y el punto. Esto permite obtener $\rho_S(2\tau)$ como

$$\rho_S(2\tau) = \text{Tr}_{12}[U_3(\tau, 2\tau) U_2(0, \tau) \rho_S(0) \otimes \rho_{B_1} U_2^\dagger(0, \tau) \rho_{B_2} U_3^\dagger(\tau, 2\tau)] = \text{Tr}_2[U_3(\tau, 2\tau) \rho_S(\tau) \rho_{B_2} U_3^\dagger(\tau, 2\tau)]$$

La correlación establecida entre $\rho_S(\tau)$ y ρ_{B2} permiten calcular la producción de entropía debido al segundo cruce. Es claro que este proceso se puede seguir iterando para un número arbitrario de cruces. Con esta aproximación el problema se ha transformado en uno equivalente al estudiado con la aproximación de interacción repetida [Barra 2015].

Nótese que la producción de entropía total en un intervalo $[0, t]$ después de L cruces es

$$\text{Tr}[\rho_{tot}(0) \ln \rho_{tot}(0)] - \text{Tr}[\rho_{tot}(t) \ln \rho_S(t) \rho_B]$$

y que $\rho_S(t)$ y $\rho_{tot}(t)$ pueden calcularse usando solo la aproximación en que la dinámica involucra a lo más dos cuerpos, es decir, sin necesidad de despreciar correlaciones. Una simplificación extra de $\rho_{tot}(t)$ involucra despreciar las correlaciones después de que un cierto número de cruces hayan ocurrido.

Una comparación de este esquema con el cálculo numérico exacto es el primer paso que sigue para continuar este trabajo.

Conclusión

El objetivo de esta tesis fue encontrar fórmulas analíticas y explícitas para algunas cantidades termodinámicas (en especial la producción de entropía) del sistema descrito en el capítulo 5. De esta manera se buscaba obtener las cantidades correspondientes para el sistema de muchos cuerpos en función de cantidades de 1 solo cuerpo. Esto último estaba motivado por el hecho de que el sistema estudiado estaba constituido por partículas interactuantes. Esta estrategia surgió como alternativa al cálculo numérico que lidia directamente con sistemas de muchos cuerpos y no busca encontrar fórmulas en función de cantidades del sistema de 1 partícula, por lo tanto este tipo de cálculo suele ser complejo y toma bastante tiempo.

En el capítulo 5 se encontró una fórmula explícita en el caso en que el sistema no tenía coherencias. Se graficó la fórmula para la producción de entropía para distintos valores y los gráficos resultaron coincidir con los ya obtenidos en el caso de la aproximación estocástica, salvo por pequeños errores que fueron lo bastante insignificantes para considerar el proceso como exitoso.

Sin embargo, en el capítulo 6 no se logró obtener una fórmula general para el caso en que el sistema sí tenía coherencias. Se obtuvieron algunos resultados para casos simples y específicos, pero parece no haber una forma simple para obtener una fórmula general. Esto último parece implicar que los cálculos futuros tendrán que ser hechos solamente a través de métodos numéricos.

Bibliografía

- [1] Bernhard Altaner. Foundations of stochastic thermodynamics. 10 2014.
- [2] Felipe Barra and Massimiliano Esposito. Dissipation in small systems: Landau-zener approach. *Phys. Rev. E*, 93:062118, Jun 2016.
- [3] V Bouchiat, D Vion, P Joyez, D Esteve, and M H Devoret. Quantum coherence with a single cooper pair. *Physica Scripta*, 1998(T76):165, 1998.
- [4] Herbert Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Wiley, second edition, 1985.
- [5] John Clarke and Frank K. Wilhelm. Superconducting quantum bits. *Nature*, 453(7198):1031–1042, 06 2008.
- [6] Sebastian Deffner and Eric Lutz. Nonequilibrium entropy production for open quantum systems. *Phys. Rev. Lett.*, 107:140404, Sep 2011.
- [7] C. Van den Broeck. Stochastic thermodynamics: A brief introduction. In *Physics of Complex Colloids*, volume 184 of *Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi*, pages 155 – 193, 2013.
- [8] C. Van den Broeck and M. Esposito. Ensemble and trajectory thermodynamics: A brief introduction. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 418:6 – 16, 2015. Proceedings of the 13th International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics.
- [9] Ilya Prigogine Dilip Kondepudi. *Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures*. Wiley, second edition, 2014.
- [10] Massimiliano Esposito. Stochastic thermodynamics under coarse graining. *Phys. Rev. E*, 85:041125, Apr 2012.
- [11] Massimiliano Esposito et al. Entropy production as correlation between system and reservoir. *New J. Phys.*, 12:013013, 2010.
- [12] Francisco Flores. Einstein’s theory of theories and types of theoretical explanation. *International Studies in the Philosophy of Science*, 13(2):123–134, 1999.

- [13] M. Grajcar, A. Izmailkov, and E. Il'ichev. Possible implementation of adiabatic quantum algorithm with superconducting flux qubits. *Phys. Rev. B*, 71:144501, Apr 2005.
- [14] Walter Greiner, Ludwig Neise, and Horst Stöcker. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Springer, 2001.
- [15] Christopher Jarzynski. Equalities and inequalities: Irreversibility and the second law of thermodynamics at the nanoscale. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2(1):329–351, 2011.
- [16] Y Kayanuma and S Fukuchi. On the probability of non-adiabatic transitions in multiple level crossings. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 18(20):4089, 1985.
- [17] Lev D Landau. Zur theorie der energieübertragung. ii. *Phys. Z. Sowjetunion*, 2(46):1–13, 1932.
- [18] Ettore Majorana. Atomi orientati in campo magnetico variabile. *Il Nuovo Cimento (1924-1942)*, 9(2):43–50, Feb 1932.
- [19] Y Nakamura, Yu A Pashkin, T Yamamoto, and J S Tsai. Coherent manipulations of charge-number states in a cooper-pair box. *Physica Scripta*, 2002(T102):155, 2002.
- [20] J P Pekola, P Solinas, A Shnirman, and D V Averin. Calorimetric measurement of work in a quantum system. *New Journal of Physics*, 15(11):115006, 2013.
- [21] Jukka P. Pekola. Towards quantum thermodynamics in electronic circuits. *Nat Phys*, 11(2):118–123, 02 2015.
- [22] U. Seifert. *Soft Matter - From Synthetic to Biological Materials : Lecture Notes of the 39th Spring School 2008 ; This Spring School was organized by the Institute of Solid State Research in the Research Centre Jülich on 3 - 14 March, 2008*, volume 1 of *Schriften des Forschungszentrums Jülich . Reihe Schlüsseltechnologien / Key Technologies*. Forschungszentrum, Zentralbibliothek, Jülich, 2008. Record converted from VDB: 12.11.2012.
- [23] Udo Seifert. Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines. *Reports on Progress in Physics*, 75(12):126001, 2012.
- [24] S.N. Shevchenko, S. Ashhab, and Franco Nori. Landau–zener–stückelberg interferometry. *Physics Reports*, 492(1):1 – 30, 2010.
- [25] Herbert Spohn and Joel L. Lebowitz. *Irreversible Thermodynamics for Quantum Systems Weakly Coupled to Thermal Reservoirs*, pages 109–142. John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [26] Curt Wittig. The landau-zener formula. *The Journal of Physical Chemistry B*, 109(17):8428–8430, 2005. PMID: 16851989.
- [27] Clarence Zener. Non-adiabatic crossing of energy levels. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 137(833):696–702, 1932.

Apéndice A

Prueba de la Ec. (4.21)

Se considera

$$G_j(\gamma_1, \dots, \gamma_N) = \sum_{\alpha_2 \dots \alpha_N} |\langle 0 | c_j c_{\alpha_2} \dots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \dots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle|^2$$

y se escribe

$$c_{\gamma_1}^\dagger \dots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p \in S_N} (-1)^p |\varphi_{\gamma_{p_1}} \rangle \dots |\varphi_{\gamma_{p_N}} \rangle \quad (\text{A.1})$$

donde p denota una permutación p_1, \dots, p_N de $1, \dots, N$ (este conjunto es S_N y tiene $N!$ elementos). p en el exponente toma un valor 1 para permutaciones pares y -1 para impares. No hay que confundir la permutación con la ocupación inicial del punto p , la cual no aparece en este apéndice. Entonces, aplicándole el operador evolución temporal al estado (A.1) y denotando ahora $U^1 = U$ a la evolución de una partícula

$$U^N c_{\gamma_1}^\dagger \dots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (-1)^p U |\varphi_{\gamma_{p_1}} \rangle \dots U |\varphi_{\gamma_{p_N}} \rangle$$

se obtiene que en términos de cantidades de una partícula (en este apéndice se usa $c_j = c_{\alpha_1}$):

$$\langle 0 | c_{\alpha_1} \dots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \dots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{p, p'} (-1)^{p+p'} \langle \varphi_{\alpha_{p'_1}} | U |\varphi_{\gamma_{p_1}} \rangle \dots \langle \varphi_{\alpha_{p'_N}} | U |\varphi_{\gamma_{p_N}} \rangle$$

debido a que se suma sobre todas las permutaciones con respecto a otra permutación. Y entonces sumando esto, se puede fijar una permutación y ver que aparece $N!$ veces, es decir

$$\langle 0 | c_{\alpha_1} \dots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \dots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle = \sum_p (-1)^p \langle \varphi_{\alpha_1} | U |\varphi_{\gamma_{p_1}} \rangle \dots \langle \varphi_{\alpha_N} | U |\varphi_{\gamma_{p_N}} \rangle \equiv x$$

Para simplificar se cambia la notación de la siguiente manera $U |\varphi_{\gamma_i} \rangle \rightarrow |\beta_i \rangle$ and $|\varphi_{\alpha_i} \rangle \rightarrow |\alpha_i \rangle$ thus

$$x = \langle 0 | c_{\alpha_1} \dots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \dots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle = \sum_p (-1)^p \langle \alpha_1 | \beta_{p_1} \rangle \dots \langle \alpha_N | \beta_{p_N} \rangle$$

Entonces el valor absoluto

$$|x|^2 = \sum_{p,p'} (-1)^{p+p'} \langle \beta_{p'} | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | \beta_{p_1} \rangle \cdots \langle \beta_{p'_N} | \alpha_N \rangle \langle \alpha_N | \beta_{p_N} \rangle$$

el cual se divide en los términos diagonales y no diagonales

$$\begin{aligned} |x|^2 &= \sum_p \langle \beta_{p_1} | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | \beta_{p_1} \rangle \cdots \langle \beta_{p_N} | \alpha_N \rangle \langle \alpha_N | \beta_{p_N} \rangle \\ &+ \sum_{p \neq p'} (-1)^{p+p'} \langle \beta_{p'} | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | \beta_{p_1} \rangle \cdots \langle \beta_{p'_N} | \alpha_N \rangle \langle \alpha_N | \beta_{p_N} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

y se suma $\sum_{\alpha_2 \dots \alpha_N}$. En los términos no diagonales se tiene $\sum_{\alpha_j=0}^L \langle \beta_{p'_j} | \alpha_j \rangle \langle \alpha_j | \beta_{p_j} \rangle = 0$ porque $p \neq p'$ y $|\beta\rangle$ son ortogonales, así que solamente contribuyen los términos diagonales. Para los términos diagonales es necesario, primero, notar que $\sum_{\alpha_j=0}^L \langle \beta_{p_j} | \alpha_j \rangle \langle \alpha_j | \beta_{p_j} \rangle = 1$ y así

$$\sum_{\alpha_2 \dots \alpha_N} |x|^2 = \sum_p \langle \alpha_1 | \beta_{p_1} \rangle \langle \beta_{p_1} | \alpha_1 \rangle$$

y, segundo, que $\sum_p = \sum_{p_1} \sum_{p \in S_{N-1}} = (N-1)! \sum_{p_1}$

Entonces

$$\sum_{\alpha_2 \dots \alpha_N} |\langle 0 | c_{\alpha_1} \cdots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \cdots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle|^2 = (N-1)! \sum_i |\langle \varphi_{\alpha_1} | U | \varphi_{\gamma_i} \rangle|^2.$$

reemplazando $\alpha_1 \rightarrow j$

$$\sum_{\alpha_2 \dots \alpha_N} |\langle 0 | c_j c_{\alpha_2} \cdots c_{\alpha_N} U^N c_{\gamma_1}^\dagger \cdots c_{\gamma_N}^\dagger | 0 \rangle|^2 = f_j(\gamma_1, \dots, \gamma_N) = (N-1)! \sum_i |\langle \varphi_j | U | \varphi_{\gamma_i} \rangle|^2.$$

Usando la notación de poblaciones se obtiene $\gamma_1 \dots \gamma_N \rightarrow n_0 \dots n_L$

$$G_j(\gamma_1, \dots, \gamma_N) = (N-1)! \sum_i |\langle \varphi_j | U | \varphi_{\gamma_i} \rangle|^2 = (N-1)! \sum_i n_i |\langle \varphi_j | U | \varphi_i \rangle|^2 = G_j^{(N)}(n_0, \dots, n_L)$$

Apéndice B

Transición de Landau-Zener

Este apéndice contiene pequeñas modificaciones de partes del artículo [24].

Se considera un sistema de 2 niveles descrito por el Hamiltoniano

$$H_{LZ}(t) = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x - \frac{\varepsilon(t)}{2}\sigma_z \quad (\text{B.1})$$

El término de interacción $\Delta = \delta_i = 2\gamma$, donde γ es el término de interacción y δ_i el valor de las brechas usados en el capítulo 4. La base diabática está formada por los autoestados de σ_z : $\{\phi_\uparrow, \phi_\downarrow\}$, que cumple $\sigma_z\phi_\uparrow = \phi_\uparrow$ y $\sigma_z\phi_\downarrow = -\phi_\downarrow$. Estos estados son autoestados de $H_{LZ}(t)$ cuando $\Delta = 0$ o cuando la energía de interacción Δ es despreciable en comparación a la diferencia de energía de los niveles (lo cual se cumple cuando se toma un instante de tiempo muy alejado del cruce). La base adiabática $\{\phi_+, \phi_-\}$ está formada por los autoestados instantáneos de $H_{LZ}(t)$ asociados a las autoenergías:

$$\begin{aligned} E_\pm(t) &= \pm \frac{1}{2}\Omega(t) \\ \Omega(t) &= \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon(t)^2} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

El diagrama de estas energías en función del tiempo se muestra en la Figura B.1. En $\varepsilon(t = 0) = 0$ se produce un *cruce evitado*, donde la brecha de energía entre los dos niveles alcanza un mínimo y es igual a Δ .

Las bases descritas anteriormente están relacionadas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \phi_\pm &= \begin{pmatrix} \beta_\mp \\ \mp\beta_\pm \end{pmatrix} = \beta_\mp(t)\phi_\uparrow \mp \beta_\pm(t)\phi_\downarrow \\ \beta_\pm &= \sqrt{\frac{\Omega \pm \varepsilon}{2\Omega}} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

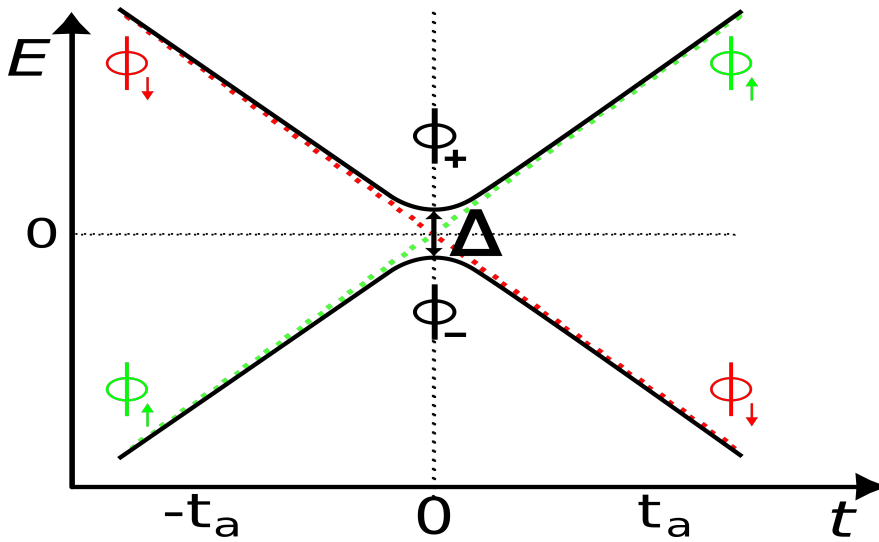


Figura B.1: Sistema de 2 niveles usado para el modelo adiabático-impulso. En la figura se muestran los niveles correspondientes a la base diabática (Φ_{\downarrow} y Φ_{\uparrow}) y a la base adiabática (Φ_{+} y Φ_{-}).

B.1. Modelo impulso-adiabático

Antes de empezar con los cálculos es necesario aclarar algunas cosas sobre las suposiciones hechas. El modelo usado para calcular la dinámica del sistema de dos niveles considera que las energías de estos niveles varían lentamente lejos del cruce evitado, esto quiere decir que cuando el sistema está alejado del cruce evitado se puede usar la aproximación adiabática. En cambio, cerca de la zona donde está el cruce evitado la variación de los niveles de energía es rápida (el impulso), por lo cual la aproximación adiabática ya no es válida. Llevando al extremo este modelo, se considerará una evolución adiabática tanto a la izquierda como a la derecha del cruce y una evolución diabática sólo en el punto donde se encuentra el cruce evitado. Luego de hacer los cálculos en estas tres zonas se realizará un empalme de las funciones de onda en los puntos de transición. Es necesario notar que en el sistema que se estudiará no se necesitan realizar aproximaciones para que se pueda aplicar este modelo debido a que se calcula la evolución del sistema desde un estado inicial conocido lejano al cruce hasta un estado final también lejano al cruce. Lo que permite hacer este modelo es calcular esta evolución total por partes: 2 zonas de evolución adiabática y una matriz de transición producto del cruce. Esta matriz de transición será despejada al realizar el empalme.

B.1.1. Evolución adiabática

Se asume que en las regiones donde no hay cruces la evolución es adiabática, por lo tanto ésta se puede escribir desde un instante inicial $t = t_i$ hasta un instante final $t = t_f$ como

$$\begin{aligned}
 \mathbf{b}(t_f) &= U(t_f, t_i)\mathbf{b}(t_i) \\
 \mathbf{b}(t) &\equiv \begin{pmatrix} b_- \\ b_+ \end{pmatrix} \\
 U(t_f, t_i) &= \begin{pmatrix} e^{i\zeta(t_f, t_i)} & 0 \\ 0 & e^{-i\zeta(t_f, t_i)} \end{pmatrix} = e^{i\zeta(t_f, t_i)\sigma_z} \\
 \zeta(t_f, t_i) &= \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} \Omega(t) dt
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

El operador de evolución temporal se puede escribir de la forma exponencial presentada en (B.4) debido a que el Hamiltoniano del sistema evaluado en un tiempo t cualquiera conmuta con el Hamiltoniano evaluado en un tiempo distinto t' .

Se considera ahora que $\varepsilon(t) = -vt$. Imponiendo la condición $v|t_a| \gg \Delta$ para establecer que tanto el estado inicial (en $t = -t_a$) como el estado final (en $t = t_a$) del sistema estarán muy alejados del cruce, se obtienen las siguientes aproximaciones para los autoestados

$$\begin{aligned}
 \phi_+ &\approx \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \phi_\downarrow = |01\rangle \\
 \phi_- &\approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \phi_\uparrow = |10\rangle \quad \text{si } t_a < 0 \\
 \phi_+ &\approx \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\phi_\uparrow = -|10\rangle \\
 \phi_- &\approx \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \phi_\downarrow = |01\rangle \quad \text{si } t_a > 0
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Ahora se calcula la fase que resulta de la evolución del sistema desde el tiempo inicial $-t_a$ hasta justo antes del cruce y de la evolución del sistema justo después del cruce hasta el tiempo final t_a .

$$\begin{aligned}
 \zeta(\pm t_a, 0) &= \frac{1}{2} \int_0^{\pm t_a} \Omega(t) dt = \frac{1}{2} \int_0^{\pm t_a} \sqrt{\Delta^2 + (vt)^2} dt \\
 &= \left[\frac{t}{4} \sqrt{(vt)^2 + \Delta^2} + \frac{\Delta^2}{4v} \ln(tv^2 + v\sqrt{(vt)^2 + \Delta^2}) \right]_0^{\pm t_a} \\
 &= \frac{\pm t_a}{4} \sqrt{(vt_a)^2 + \Delta^2} + \frac{\Delta^2}{4v} \ln(\pm t_a v^2 + v\sqrt{(vt_a)^2 + \Delta^2}) - \frac{\Delta^2}{4v} \ln(v\Delta) \\
 &= \frac{\pm vt_a^2}{4} \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{vt_a}\right)^2} + \frac{\Delta^2}{4v} \ln \left(\pm t_a v^2 + v^2 t_a \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{vt_a}\right)^2} \right) - \frac{\Delta^2}{4v} \ln(v\Delta)
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

recordando que $\pm t_a$ se encuentran en regiones asintóticas, es decir, que $v|t_a| \gg \Delta$, y definiendo $\delta = \frac{\Delta^2}{4v}$, se puede simplificar la ec. (B.6)

$$\begin{aligned}
\zeta(t_a, 0) &\approx \frac{v}{4}t_a^2 \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{vt_a} \right)^2 \right) + \frac{\Delta^2}{4v} \ln \left(v^2 t_a + v^2 t_a \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{vt_a} \right)^2 \right) \right) - \delta \ln(v\Delta) \\
&\approx \frac{v}{4}t_a^2 + \frac{\delta}{2} + \delta \ln(2v^2 t_a + \frac{\Delta^2}{2t_a}) - \delta \ln(v\Delta) \\
&= \frac{v}{4}t_a^2 + \frac{\delta}{2} + \delta \ln(2v^2 t_a (1 + \frac{\Delta^2}{4v^2 t_a^2})) - \delta \ln(v\Delta) \\
&= \frac{v}{4}t_a^2 + \frac{\delta}{2} + \delta \ln(2v^2 t_a) + \delta \ln((1 + \frac{\delta}{vt_a^2})) - \delta \ln(v\Delta) \\
&\approx \frac{v}{4}t_a^2 + \frac{\delta}{2} + \delta \ln(\sqrt{vt_a}) + \frac{\delta}{vt_a^2} - \delta \ln(\frac{\Delta}{2\sqrt{v}}) \\
&\approx \frac{v}{4}t_a^2 + \frac{\delta}{2} + \delta \ln(\sqrt{vt_a}) - \frac{\delta}{2} \ln \delta
\end{aligned} \tag{B.7}$$

$$\begin{aligned}
\zeta(-t_a, 0) &\approx -\frac{v}{4}t_a^2 \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{vt_a} \right)^2 \right) + \frac{\Delta^2}{4v} \ln \left(-v^2 t_a + v^2 t_a \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{vt_a} \right)^2 \right) \right) - \delta \ln(v\Delta) \\
&\approx -\frac{v}{4}t_a^2 - \frac{\delta}{2} + \delta \ln(\frac{\Delta^2}{2t_a}) - \delta \ln(v\Delta) \\
&= -\frac{v}{4}t_a^2 - \frac{\delta}{2} + \delta \ln(\frac{\Delta}{2\sqrt{v}}) - \delta \ln(\sqrt{vt_a}) \\
&= -\frac{v}{4}t_a^2 - \frac{\delta}{2} + \frac{\delta}{2} \ln \delta - \delta \ln(\sqrt{vt_a})
\end{aligned} \tag{B.8}$$

B.1.2. Transición no adiabática

Escribiendo el estado del sistema como $\psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$, la ecuación de Schrödinger $i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H_{LZ}(t)\psi$ toma la forma

$$\begin{aligned}
i\frac{da_1}{dt} &= \frac{v}{2}ta_1 - \frac{\Delta}{2}a_2 \\
i\frac{da_2}{dt} &= -\frac{\Delta}{2}a_1 - \frac{v}{2}ta_2
\end{aligned} \tag{B.9}$$

Derivando la primera ecuación, reemplazando las ecuaciones (B.9) en ella, usando el cambio de variable $z = \sqrt{\frac{v}{2}}t$ y haciendo el proceso análogo con la segunda ecuación se obtienen ecuaciones de Weber de segundo orden

$$\frac{d^2 a_{1,2}}{dz^2} + (2\delta \pm i + z^2)a_{1,2} = 0 \quad (\text{B.10})$$

Las soluciones de esta ecuación son funciones cilíndricas parabólicas

$$\begin{aligned} a_1 &= \sum_{\pm} B_{\pm} D_{-i\delta}(\pm\sqrt{2}e^{i\pi/4}z) \\ a_2 &= \sum_{\pm} A_{\pm} D_{-1-i\delta}(\pm\sqrt{2}e^{i\pi/4}z) \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Reemplazando estas soluciones en las ecuaciones B.9 y usando la fórmula de recurrencia de las funciones parabólicas se obtiene

$$B_{\pm} = \mp \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{\delta}} A_{\pm} \quad (\text{B.12})$$

Considerando puntos muy alejados del cruce (donde $z = 0$) $z = \pm z_a$ con $z_a \gg 1$ y usando los valores asintóticos de las funciones parabólicas se obtiene:

$$\begin{aligned} a_1(-z_a) &\approx (-e^{-\frac{\pi\delta}{2}} A_+ + e^{\frac{\pi\delta}{2}} A_-) \Xi_2 e^{-i\Phi(z_a)} \\ a_2(-z_a) &\approx A_+ \Xi_1 e^{i\Phi(z_a)} \\ a_1(z_a) &\approx (-e^{\frac{\pi\delta}{2}} A_+ + e^{-\frac{\pi\delta}{2}} A_-) \Xi_2 e^{-i\Phi(z_a)} \\ a_2(z_a) &\approx A_- \Xi_1 e^{i\Phi(z_a)} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

donde

$$\begin{aligned} \Xi_1 &\equiv \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1+i\delta)} \exp\left(-\frac{\pi}{4}\delta\right) \\ \Xi_2 &\equiv \frac{1}{\sqrt{\delta}} \exp\left(-i\frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{4}\delta\right) \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

con $\Gamma(z) = \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-x} dx$.

Ahora se igualan estas soluciones asintóticas con la solución adiabática, $\psi(t) = b_{\pm} \phi_{\pm}$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} b_- \\ b_+ \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \text{ en } t_a < 0 \\ \begin{pmatrix} -b_+ \\ b_- \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \text{ en } t_a > 0 \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Considérese ahora una matriz N que describe la transición del cruce evitado, es decir:

$$\mathbf{b}(t_{1,2} + 0) = N\mathbf{b}(t_{1,2} - 0) \quad (\text{B.16})$$

Recordando el modelo adiabático-impulso, la evolución del sistema se puede escribir de manera secuencial: una evolución adiabática desde $t = -t_a$ hasta $t = 0^-$, una transición no-adiabática en $t = 0$ y una evolución adiabática desde $t = 0^+$ hasta $t = t_a$:

$$\mathbf{b}(t_a) = \mathbf{M}\mathbf{b}(-t_a) = U(t_a, 0^+)NU(0^-, -t_a)\mathbf{b}(-t_a) = e^{i\sigma_z\zeta(t_a,0)}Ne^{i\sigma_z\zeta(t_a,0)}\mathbf{b}(-t_a) \quad (\text{B.17})$$

donde la última igualdad se obtiene debido a que

$$\begin{aligned} U(0^-, -t_a) &= e^{i\zeta(0^-, -t_a)\sigma_z} \\ &= e^{-i\zeta(-t_a, 0^+)\sigma_z} \\ &= e^{i\zeta(t_a, 0^+)\sigma_z} = U(t_a, 0^+) \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Denotando $N = \begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} \\ n_{21} & n_{22} \end{pmatrix}$ y usando las ecs. (B.15) y las soluciones asintóticas de (B.13) se obtiene

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} A_- \Xi_1 e^{i\Phi(z_a)} \\ (e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_+ - e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_-) \Xi_2 e^{-i\Phi(z_a)} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\zeta(t_a,0)} & 0 \\ 0 & e^{i\zeta(t_a,0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} \\ n_{21} & n_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\zeta(t_a,0)} & 0 \\ 0 & e^{i\zeta(t_a,0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (-e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_+ + e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_-) \Xi_2 e^{-i\Phi(z_a)} \\ A_+ \Xi_1 e^{i\Phi(z_a)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Desarrollando el lado derecho de (B.19) se obtiene

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} A_- \Xi_1 e^{i\Phi(z_a)} \\ (e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_+ - e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_-) \Xi_2 e^{-i\Phi(z_a)} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} n_{11} e^{i(\Phi(z_a) + \frac{\pi}{2} - 2\Phi_\delta)} \Xi_2 (-e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_+ + e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_-) + n_{12} e^{i\Phi(z_a)} \Xi_1 A_+ \\ n_{21} e^{-i\Phi(z_a)} \Xi_2 (-e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_+ + e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_-) + n_{22} e^{-i(\Phi(z_a) - 2\Phi_\delta + \frac{\pi}{2})} \Xi_1 A_+ \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Igualando los coeficientes que acompañan a A_+ y A_- se obtienen las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} e^{\frac{\pi}{2}\delta} \Xi_2 e^{-i\Phi(z_a)} &= n_{22} e^{-i(\Phi(z_a) - \frac{\pi}{2} + 2\Phi_\delta)} \Xi_1 - n_{21} e^{-i\Phi(z_a)} e^{\frac{\pi}{2}\delta} \Xi_2 \\ -e^{-\frac{\pi}{2}\delta} \Xi_2 e^{-i\Phi(z_a)} &= n_{21} e^{-i\Phi(z_a)} e^{\frac{\pi}{2}\delta} \Xi_2 \\ \Xi_1 e^{i\Phi(z_a)} &= n_{11} e^{i(\Phi(z_a) - 2\Phi_\delta + \frac{\pi}{2})} \Xi_2 e^{\frac{\pi}{2}\delta} \\ 0 &= n_{12} e^{i\Phi(z_a)} \Xi_1 - n_{11} e^{i(\Phi(z_a) - 2\Phi_\delta + \frac{\pi}{2})} e^{-\frac{\pi}{2}\delta} \Xi_2 \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Despejando los coeficientes de la matriz N se obtiene

$$\begin{aligned}
n_{21} &= -e^{-\pi\delta} \\
n_{22} &= e^{\frac{\pi}{2}\delta}(1 - e^{-2\pi\delta})e^{-2i(\Phi_\delta - \frac{\pi}{4})} \frac{\Xi_2}{\Xi_1} \\
&= e^{\frac{\pi}{2}\delta}(1 - e^{-2\pi\delta})e^{-2i(\Phi_\delta - \frac{\pi}{4})} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{\Gamma(1 + i\delta)}{\sqrt{2\pi\delta}} \\
n_{11} &= e^{2i(\Phi_\delta - \frac{\pi}{4})} e^{-\frac{\pi}{2}\delta} \frac{\Xi_2}{\Xi_1} = e^{2i(\Phi_\delta - \frac{\pi}{4})} e^{-\frac{\pi}{2}\delta} e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{\sqrt{2\pi\delta}}{\Gamma(1 + i\delta)} \\
n_{12} &= e^{-\pi\delta}
\end{aligned} \tag{B.22}$$

Usando la propiedad $\Gamma(1 + i\delta)\Gamma(1 - i\delta) = \pi\delta/\sinh(\pi\delta)$, notando que $\Gamma(1 + i\delta)\Gamma(1 - i\delta) = |\Gamma(1 - i\delta)|^2$ y que $\Gamma(1 - i\delta) = |\Gamma(1 - i\delta)|e^{i\arg\Gamma(1 - i\delta)}$ se puede escribir

$$\begin{aligned}
\Gamma(1 + i\delta) &= \frac{|\Gamma(1 - i\delta)|^2}{\Gamma(1 - i\delta)} = \sqrt{\frac{\pi\delta}{\sinh(\pi\delta)}} \frac{|\Gamma(1 - i\delta)|}{\Gamma(1 - i\delta)} \\
&= \sqrt{\frac{2\pi\delta}{e^{\pi\delta} - e^{-\pi\delta}}} \frac{|\Gamma(1 - i\delta)|}{\Gamma(1 - i\delta)} = \sqrt{\frac{2\pi\delta}{e^{\pi\delta}(1 - e^{-2\pi\delta})}} e^{-i\arg\Gamma(1 - i\delta)}
\end{aligned} \tag{B.23}$$

donde $\Gamma(1 - i\delta) = \int_0^\infty x^{-i\delta} e^{-x} dx$ es un número complejo, así que se puede escribir en coordenadas polares $\Gamma(1 - i\delta) = |\Gamma(1 - i\delta)|e^{i\arg\Gamma(1 - i\delta)} = |\int_0^\infty x^{-i\delta} e^{-x} dx| e^{i\arg \int_0^\infty x^{-i\delta} e^{-x} dx}$

Entonces se obtiene

$$\begin{aligned}
n_{22} &= \sqrt{1 - e^{-2\pi\delta}} e^{-i(\arg\Gamma(1 - i\delta) + 2\Phi_\delta - \frac{\pi}{4})} \\
&= \sqrt{1 - R} e^{-i(\arg\Gamma(1 - i\delta) + \delta(\ln\delta - 1) - \frac{\pi}{4})} \\
n_{11} &= \sqrt{1 - R} e^{i(\arg\Gamma(1 - i\delta) + \delta(\ln\delta - 1) - \frac{\pi}{4})} \\
n_{21} &= -\sqrt{R} \\
n_{12} &= \sqrt{R}
\end{aligned} \tag{B.24}$$

Donde $R = e^{-2\pi\delta}$ es la probabilidad de transición de un nivel de la base adiabática a otro (conocida como probabilidad de transición de Landau-Zaner) y $\varphi_S = \frac{\pi}{4} + \delta(\ln\delta - 1) + \arg\Gamma(1 - i\delta)$ se conoce como fase de Stokes. Si se define $\tilde{\varphi}_S = \varphi_S - \frac{\pi}{2}$, entonces la matriz N es

$$N = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - R} e^{i\tilde{\varphi}_S} & \sqrt{R} \\ -\sqrt{R} & \sqrt{1 - R} e^{-i\tilde{\varphi}_S} \end{pmatrix} \tag{B.25}$$

Finalmente, retomando la ec. (B.17) la función de onda en la base adiabática puede ser escrita de la forma

$$\psi(-\infty) = b_-(-\infty)\phi_-(-\infty) + b_+(-\infty)\phi_+(-\infty) \tag{B.26}$$

y

$$\psi(\infty) = b_-(+\infty)\phi_-(-\infty) + b_+(\infty)\phi_+(\infty) \quad (\text{B.27})$$

Por lo tanto

$$\psi(+\infty) = [M_{11}b_-(-\infty) + M_{12}b_+(-\infty)]\phi_-(+\infty) + [M_{21}b_-(-\infty) + M_{22}b_+(-\infty)]\phi_+(\infty) \quad (\text{B.28})$$

Recordando las aproximaciones establecidas en (B.5), la función de onda del sistema se puede escribir en la base diabática

$$b_-(-\infty)\phi_\uparrow + b_+(-\infty)\phi_\downarrow \quad (\text{B.29})$$

y

$$\psi(+\infty) = [M_{11}b_-(-\infty) + M_{12}b_+(-\infty)]\phi_\downarrow - [M_{21}b_-(-\infty) + M_{22}b_+(-\infty)]\phi_\uparrow \quad (\text{B.30})$$

De esta manera, la matriz \mathbf{L} que mapea $\mathbf{a}(-\infty)$ a $\mathbf{a}(\infty)$, es decir $\mathbf{a}(\infty) = \mathbf{L}\mathbf{a}(-\infty)$ está dada por

$$\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{12} & M_{11} \\ -M_{22} & -M_{21} \end{pmatrix} \quad (\text{B.31})$$

$$M = \begin{pmatrix} e^{i\zeta(t_a)} & 0 \\ 0 & e^{-i\zeta(t_a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - Re^{i\varphi_s}} & \sqrt{R} \\ -\sqrt{R} & \sqrt{1 - Re^{-i\varphi_s}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\zeta(t_a)} & 0 \\ 0 & e^{-i\zeta(t_a)} \end{pmatrix} \quad (\text{B.32})$$

B.2. Hamiltoniano modificado

En el capítulo 5 se usa el Hamiltoniano

$$H_n(t) = \begin{pmatrix} vt & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.33})$$

Este Hamiltoniano conmuta con $H_{LZ}(t)$, así que se puede usar la base de autoestados de H_{LZ} para diagonalizar H_n . Lo único que cambia del cálculo anterior hecho para H_{LZ} son los valores de las autoenergías (como muestra la Figura B.2), cambiando con ellas el valor de la fase ζ . Las autoenergías de $H_n(t)$ son

$$\begin{aligned} E_\pm(t) &= \frac{1}{2}(vt \pm \Omega(t)) \\ \Omega(t) &= \sqrt{\Delta^2 + (vt)^2} \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

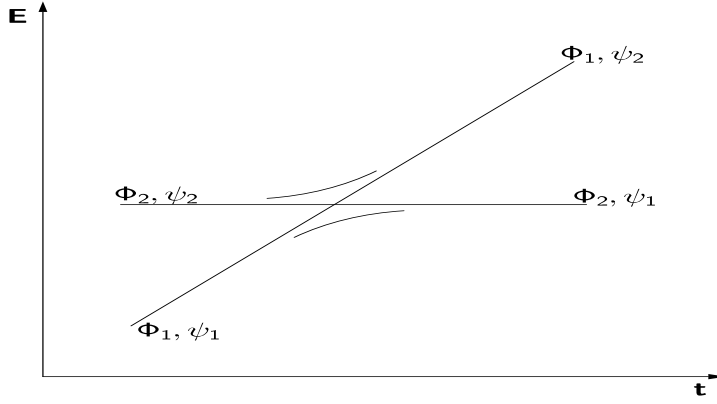


Figura B.2: Comparación entre los niveles de energía correspondientes a la base diabática (Φ_1 y Φ_2) y a la base adiabática (ψ_1 y ψ_2).

como se muestra en la figura B.2

Entonces ahora la fase de la evolución adiabática es

$$\begin{aligned}
\exp\left(-i \int_0^t E_{\pm}(t') dt'\right) &= \exp\left(-\frac{i}{2} \int_0^t (vt' \pm \Omega(t')) dt'\right) \\
&= \exp\left(-\frac{i}{2} \int_0^t vt' dt'\right) \exp\left(\mp \frac{i}{2} \int_0^t \Omega(t') dt'\right) \\
&= \exp\left(-\frac{i}{4} vt^2\right) \exp(\mp i \zeta(t, 0))
\end{aligned} \tag{B.35}$$

Considerando nuevamente las regiones asintóticas, se puede evaluar la expresión anterior en los tiempos $\pm t_a$ que cumplen la condición $v|t_a| \gg \Delta$. Entonces se pueden usar los cálculos hechos en las ecuaciones (7), (8) y (9), donde

$$\begin{aligned}
\zeta(\pm t_a, 0) &\approx \pm \left[\Phi\left(\sqrt{\frac{v}{2}} t_a\right) - \Phi_{\delta} \right] \\
\Phi(t_a) &= \frac{v}{2} t_a^2 + \delta \ln \sqrt{v} t_a \\
\Phi_{\delta} &= \frac{1}{2} \delta (\ln \delta - 1)
\end{aligned} \tag{B.36}$$

Por lo tanto

$$\exp\left(-i \int_0^{\pm t_a} E_{\pm}(t') dt'\right) = \exp\left(-\frac{i}{4} vt_a^2\right) \exp(\mp i \zeta(\pm t_a, 0)) \tag{B.37}$$

Entonces los operadores de evolución adoptan la forma

$$U(t_a, 0^+) = \begin{pmatrix} e^{i(\zeta(t_a,0) - \frac{1}{2} \int_0^{t_a} vtdt)} & 0 \\ 0 & e^{-i(\zeta(t_a,0) + \frac{1}{2} \int_0^{t_a} vtdt)} \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{4}vt_a^2} e^{i\zeta(t_a,0)\sigma_z} \quad (\text{B.38})$$

$$U(0^-, -t_a) = \begin{pmatrix} e^{i(\zeta(t_a) - \frac{1}{2} \int_{-t_a}^0 vtdt)} & 0 \\ 0 & e^{-i(\zeta(t_a) + \frac{1}{2} \int_{-t_a}^0 vtdt)} \end{pmatrix} = e^{\frac{i}{4}vt_a^2} e^{i\zeta(t_a,0)\sigma_z} \quad (\text{B.39})$$

B.2.1. Transición no adiabática para el Hamiltoniano modificado

La ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano H_n es $i\dot{\psi} = H_n\psi$, que se puede escribir matricialmente

$$i \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} vt & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{vt}{2} & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & -\frac{vt}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} + \frac{vt}{2} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.40})$$

Definiendo

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = e^{-i\frac{vt^2}{4}} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.41})$$

se obtiene la ecuación

$$i \begin{pmatrix} \dot{a}_1 \\ \dot{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{vt}{2} & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & -\frac{vt}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.42})$$

que es justamente la ecuación (B.9). Es decir que se puede ocupar el cambio de fase (B.41) para obtener la matriz de la transición no adiabática del Hamiltoniano H_n de la misma forma en que se obtiene la matriz de la transición no adiabática del Hamiltoniano H_{LZ} en la sección anterior. Hay que notar la fase que aparece en (B.9) es la misma fase que aparece en (B.35). Entonces, debido a la forma de las ecs. (B.38) y (B.39), la evolución de este sistema tiene la misma forma que la ec. (B.32)

$$M = \begin{pmatrix} e^{i\zeta(t_a)} & 0 \\ 0 & e^{-i\zeta(t_a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - Re} e^{i\tilde{\varphi}_S} & \sqrt{R} \\ -\sqrt{R} & \sqrt{1 - Re} e^{-i\tilde{\varphi}_S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\zeta(t_a)} & 0 \\ 0 & e^{-i\zeta(t_a)} \end{pmatrix} \quad (\text{B.43})$$

Por lo tanto $M_{21} = -\sqrt{R}$ y $M_{11} = \sqrt{1 - Re} e^{i\tilde{\varphi}_S} e^{2i\zeta(t_a)}$, $M_{12} = \sqrt{R}$ y $M_{22} = \sqrt{1 - Re} e^{-i\tilde{\varphi}_S} e^{-2i\zeta(t_a)}$.

Se tiene

$$\psi(+\infty) = [M_{11}b_-(-\infty) + M_{12}b_+(-\infty)] |01\rangle - [M_{21}b_-(-\infty) + M_{22}b_+(-\infty)] |10\rangle \quad (\text{B.44})$$

y tomando la notación del Capítulo 5

$$\begin{aligned} \psi(+\infty) &= L\psi(-\infty) = U^{(1)}\psi(-\infty) \\ &= U^{(1)}[b_-(-\infty |10\rangle + b_+(-\infty |01\rangle)] \\ &= b_-(-\infty)[\alpha_1 |01\rangle + \beta_1 |10\rangle] + b_+(-\infty)[\alpha_2 |10\rangle + \beta_2 |01\rangle] \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

$$\psi(+\infty) = [\alpha_1 b_-(-\infty) + \alpha_2 b_+(-\infty)] |01\rangle - [\beta_1 b_-(-\infty) + \alpha_2 b_+(-\infty)] |10\rangle \quad (\text{B.46})$$

Por lo cual se puede identificar $\alpha_1 = M_{11}$, $\beta_2 = M_{12}$, $\beta_1 = -M_{21}$ y $\alpha_2 = -M_{22}$.

B.2.2. Transformación para un nivel del baño arbitrario

Por último, se analiza el caso en que el nivel de energía del baño no es cero

$$H_n(t) = \begin{pmatrix} vt & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & \varepsilon_B \end{pmatrix} \quad (\text{B.47})$$

Las autoenergías de este Hamiltoniano son

$$E_{\pm}(t) = \frac{1}{2}(\varepsilon_B + vt) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_B + vt)^2 + 4(\Delta^2 - vt\varepsilon_B)} \quad (\text{B.48})$$

definiendo $\tau = \varepsilon_B/v$ los autovalores se pueden reescribir como

$$\begin{aligned} E_{\pm}(t) &= \frac{1}{2}v(t + \tau) \pm \frac{1}{2}\sqrt{v^2(t + \tau)^2 + 4\left(\frac{\Delta^2}{4} - v^2t\tau\right)} \\ &= \frac{1}{2}[v(t + \tau) \pm \sqrt{v^2(t - \tau)^2 + \Delta^2}] \\ &= \frac{1}{2}[v(t + \tau) \pm \Omega(t - \tau)] \end{aligned} \quad (\text{B.49})$$

Entonces el cálculo de la fase acumulada durante la evolución adiabática del sistema es

$$\begin{aligned} \exp\left(-i \int_0^{\pm t_a} E_{\pm}(t) dt\right) &= \exp\left(-\frac{i}{2} \int_0^{\pm t_a} (v(t + \tau) \pm \Omega(t - \tau)) dt\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{2} \int_{\tau}^{\pm t_a + \tau} vt' dt'\right) \exp\left(\mp \frac{i}{2} \int_{-\tau}^{\pm t_a - \tau} \Omega(t'') dt''\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{4}(vt_a^2 \pm 2\varepsilon_B t_a)\right) \exp(\mp i\zeta(\pm t_a - \tau, -\tau)) \end{aligned} \quad (\text{B.50})$$

El cálculo que se necesita realizar en este caso es la evolución del estado del sistema desde un tiempo $t = -t_a + \tau$ hasta un tiempo $t = t_a + \tau$.

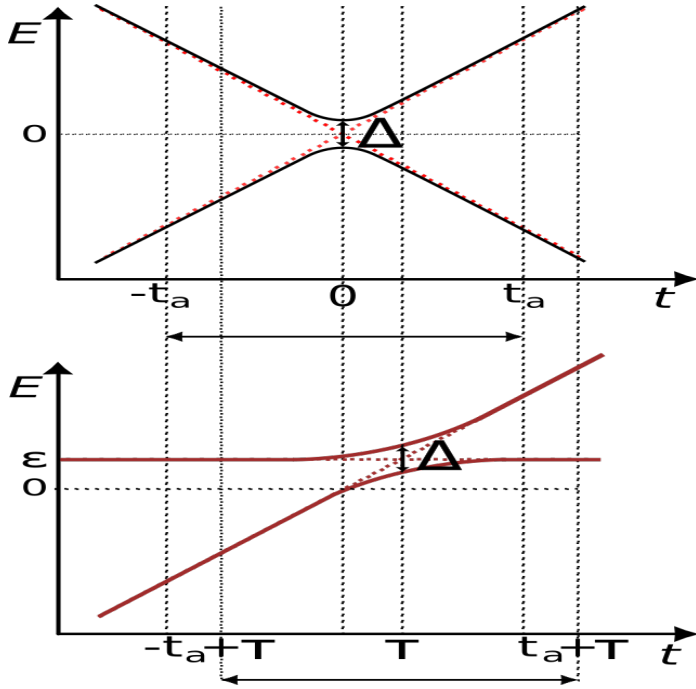


Figura B.3: Para usar el modelo impulso-adiabático en el sistema estudiado en esta tesis, es necesario realizar una traslación temporal y una rotación de los niveles de energía.

Entonces la fase acumulada es

$$\begin{aligned}
\exp\left(-i \int_{\tau}^{\pm t_a + \tau} E_{\pm}(t) dt\right) &= \exp\left(-\frac{i}{2} \int_{\tau}^{\pm t_a + \tau} (v(t + \tau) \pm \Omega(t - \tau)) dt\right) \\
&= \exp\left(-\frac{i}{2} \int_{2\tau}^{\pm t_a + 2\tau} vt' dt'\right) \exp\left(\mp \frac{i}{2} \int_0^{\pm t_a} \Omega(t'') dt''\right) \quad (\text{B.51}) \\
&= \exp\left(-\frac{i}{4} (vt_a^2 \pm 4\varepsilon_B t_a)\right) \exp(\mp i\zeta(\pm t_a, 0))
\end{aligned}$$

Entonces los operadores de evolución temporal en este caso son

$$\tilde{U}(t_a + \tau, \tau) = \begin{pmatrix} \exp\left(-i \int_{\tau}^{t_a + \tau} E_+(t) dt\right) & \\ & 0 \\ 0 & \exp\left(-i \int_{\tau}^{t_a + \tau} E_-(t) dt\right) \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{4} vt_a^2} e^{-i\varepsilon_B t_a} e^{i\zeta(t_a, 0)\sigma_z} \quad (\text{B.52})$$

$$\tilde{U}(\tau, -t_a + \tau) = \begin{pmatrix} \exp\left(-i \int_{\tau}^{-t_a + \tau} E_+(t) dt\right) & \\ & 0 \\ 0 & \exp\left(-i \int_{\tau}^{-t_a + \tau} E_-(t) dt\right) \end{pmatrix} = e^{\frac{i}{4} vt_a^2} e^{-i\varepsilon_B t_a} e^{i\zeta(t_a, 0)\sigma_z} \quad (\text{B.53})$$

Entonces la matriz correspondiente a la evolución total del sistema es $M =$

$$e^{-2i\varepsilon_B t_a} \begin{pmatrix} e^{i\zeta(t_a)} & 0 \\ 0 & e^{-i\zeta(t_a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - R} e^{i\varphi_S} & \sqrt{R} \\ -\sqrt{R} & \sqrt{1 - R} e^{-i\varphi_S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\zeta(t_a)} & 0 \\ 0 & e^{-i\zeta(t_a)} \end{pmatrix} \quad (\text{B.54})$$

Por lo tanto $M_{21} = -\sqrt{R}$ y $M_{11} = \sqrt{1 - R}e^{i\varphi_S}e^{2i\zeta(t_a)}e^{-2i\varepsilon_B t_a}$, $M_{12} = \sqrt{R}$ y $M_{22} = \sqrt{1 - R}e^{-i\varphi_S}e^{-2i\zeta(t_a)}e^{-2i\varepsilon_B t_a}$.

Se puede realizar el siguiente procedimiento para conectar este Hamiltoniano con el Hamiltoniano de (B.9)

$$\begin{aligned}
i\frac{d\tilde{U}}{dt} &= \begin{pmatrix} vt & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & \varepsilon_B \end{pmatrix} \tilde{U} \\
&= \left[\begin{pmatrix} vt - \varepsilon_B & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_B & 0 \\ 0 & \varepsilon_B \end{pmatrix} \right] \tilde{U} \\
&= \left[\begin{pmatrix} v(t - \tau) & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_B & 0 \\ 0 & \varepsilon_B \end{pmatrix} \right] \tilde{U} \\
&= \left[\begin{pmatrix} v(t - \tau)/2 & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & -v(t - \tau)/2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v(t - \tau)/2 + \varepsilon_B & 0 \\ 0 & v(t - \tau)/2 + \varepsilon_B \end{pmatrix} \right] \tilde{U} \\
&= \left[\begin{pmatrix} v(t - \tau)/2 & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & -v(t - \tau)/2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} vt/2 + \varepsilon_B/2 & 0 \\ 0 & vt/2 + \varepsilon_B/2 \end{pmatrix} \right] \tilde{U}
\end{aligned} \tag{B.55}$$

donde se definió $\tau = \varepsilon_B/v$. La solución de (B.55) es

$$\tilde{U}(t, 0) = \exp\left(-\frac{i}{4}(vt^2 + 2\varepsilon_B t)\right) U(t - \tau, -\tau) \tag{B.56}$$

donde $U(t, 0)$ es la solución de

$$i\frac{dU}{dt} = \begin{pmatrix} vt/2 & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & -vt/2 \end{pmatrix} U \tag{B.57}$$