



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

CICLOS DISIPATIVOS DE CARGA Y DESCARGA DE UNA BATERÍA CUÁNTICA

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

DANIEL ANTONIO FELIÚ ARAYA

PROFESOR GUÍA:
FELIPE BARRA DE LA GUARDA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
RODRIGO SOTO BERTRÁN
SERGIO RICA MERY

SANTIAGO DE CHILE
2023

Resumen

En esta tesis estudiamos ciclos termodinámicos en que se carga y descarga una batería cuántica. La carga de la batería corresponde a energía útil almacenada que puede ser extraída. Los ciclos se implementan dinámicamente, pues cada rama corresponde a una evolución unitaria de un sistema compuesto: la batería más un baño (o medio ambiente). La batería es modelada por un oscilador armónico cuántico que interactúa linealmente con un baño (finito o infinito) formado por un conjunto de osciladores armónicos cuánticos. Este modelo corresponde al modelo de Caldeira-Leggett, cuyo Hamiltoniano es cuadrático en los operadores canónicos. Para implementar las distintas dinámicas se ocupan herramientas del formalismo simpléctico definido en un espacio de fase, pero en una etapa previa, abordamos el estudio del estado inicial y final de la batería en los ciclos con herramientas del formalismo simpléctico y también con herramientas de la teoría de sistemas cuánticos abiertos definida en un espacio de Hilbert: ecuación de Langevin. El formalismo simpléctico nos permitió tratar numéricamente cada evolución del sistema compuesto con cantidades finitas y también nos permitió tener acceso al estado de la batería y al estado del baño en cada instante. Trabajamos con estados Gaussianos para la batería y el baño. Estos estados son totalmente caracterizables por sus primeros y segundos momentos estadísticos. En general, exploramos dos situaciones distintas para los ciclos: proceso de desconexión batería-baño con protocolo quench instantáneo y proceso de desconexión batería-baño con protocolo dependiente del tiempo y duración finita. Demostramos la validez de la segunda ley de la termodinámica en la forma de Kelvin-Planck en los ciclos y demostramos la igualdad entre el estado Gibbsiano de fuerza media –estado inicial de la batería– y el estado estacionario de la dinámica de carga en el límite termodinámico –estado final de la batería–. Finalmente, a partir de los resultados numéricos obtuvimos que la utilidad de la máquina es que bajo ciertas condiciones y regímenes de parámetros la batería se carga, y del análisis de la eficiencia, obtuvimos que la máquina es más eficiente cuando funciona fuera del equilibrio termodinámico y con mayor disipación.

Tabla de Contenido

Introducción	1
1. Mecánica cuántica Gaussiana	3
1.1. Sistemas de variable continua y espacio de fase “cuántico”	3
1.2. Estados Gaussianos	6
1.3. Transformaciones unitarias y grupo simpléctico	7
1.3.1. Evolución temporal de un estado cuántico Gaussiano	11
1.4. Aspectos relevantes del capítulo	12
2. Termodinámica en sistemas cuánticos	14
2.1. Estados pasivo y activo	14
2.1.1. Ergotropía	15
2.2. Baterías cuánticas disipativas	17
2.2.1. Ciclo de carga y descarga	17
2.2.2. Trabajo: sistema cerrado	19
2.2.3. Trabajo disipado y eficiencia	19
2.2.4. Energética del ciclo cuando $\hat{\tau}_{\text{tot}}$ es un estado Gaussiano con primeros momentos nulos	22
2.3. Aspectos relevantes del capítulo	22
3. Modelo de Caldeira-Leggett (CL)	24
3.1. Hamiltoniano	24
3.2. Ecuación de Langevin	26

3.2.1.	Solución ecuación de Langevin	29
3.2.2.	Límite continuo	31
3.2.2.1.	Regularización de Lorentz-Drude	33
3.2.2.2.	Estado estacionario del oscilador central	35
3.3.	Teoría de respuesta lineal	37
3.3.1.	Funciones de correlación y valores de expectación en el equilibrio térmico del modelo CL	38
3.3.2.	Estado Gibbsiano de fuerza media	41
3.4.	Evolución simpléctica	42
3.4.1.	Baño finito	43
3.4.1.1.	Muestra homogénea de frecuencias	43
3.4.1.2.	Muestra Lorentziana de frecuencias	46
3.5.	Aspectos relevantes del capítulo	47
4.	Ciclos de carga y descarga aplicados al modelo CL con baño finito	52
4.1.	Ciclo con protocolos de conexión y desconexión tipo quench	54
4.1.1.	Ergotropía	54
4.1.2.	Trabajos	56
4.1.2.1.	Trabajo de desconexión	56
4.1.2.2.	Trabajo de conexión	58
4.1.2.3.	Trabajo disipado	60
4.1.3.	Eficiencia	60
4.1.4.	Proceso de carga y producción de entropía	62
4.2.	Ciclos con protocolos de desconexión dependientes del tiempo y protocolo de conexión tipo quench	68
4.2.1.	Ergotropía, $\mathcal{W}(t_d)$	69
4.2.2.	Trabajo de desconexión, $W_d(t_d)$	71
4.2.3.	Trabajo de conexión, $W_c(t_d)$	72
4.2.4.	Trabajo disipado, $W_{\text{dis}}(t_d)$	73

4.2.5. Eficiencia, $\eta(t_d)$	78
Conclusión	81
Bibliografía	91
A. Uso de las relaciones de Kramers-Kronig para la obtención de la expresión (3.46) y desarrollo del conmutador $[\hat{Q}_0(+\infty), \hat{P}_0(+\infty)]$ para obtener la identidad (3.48)	92
B. Deducción de la expresión (3.85) para $S(\tau)$	94
C. Implementación numérica de la evolución simpléctica $S_d(t)$	96

Introducción

La termodinámica surge como una ciencia fenomenológica cuyos fines en su origen fueron prácticos: “Todos sabemos que el calor puede producir movimiento”(Sadi Carnot) [1]. Hoy en día la entendemos como un conjunto de leyes simples y generales, capaces de describir el incesante flujo de energía entre sistemas macroscópicos de los más variados en el universo. Una de sus manifestaciones más robustas es la termalización de un sistema macroscópico en contacto con un baño térmico.

En los sistemas cuánticos las fluctuaciones cuánticas y térmicas juegan un rol crucial. Desarrollar una teoría termodinámica que las considere es necesario para dar cuenta de los fenómenos que pueden ser observados gracias a técnicas experimentales recientes [2]. Sobre este objetivo, la termodinámica cuántica ha mostrado significativos avances en las últimas décadas [3, 4, 5, 6]. Entonces, ¿por qué no pensar en una teoría termodinámica completa, en que la robustez de las leyes ya conocidas se mantenga para sistemas de tamaño muy por debajo del límite termodinámico? Se ha probado que sistemas con pocos grados de libertad que interactúan con baños térmicos alcanzan un estado de equilibrio, tanto cuando el acoplamiento es débil como cuando el acoplamiento es fuerte [7], y en este último caso, existe un potencial energético almacenado en las correlaciones que puede ser aprovechado.

En este contexto surge la pregunta sobre la posibilidad de almacenar energía en sistemas nanoscópicos llamados *baterías cuánticas* [8]. Actualmente se pueden categorizar en dos los tipos de sistemas que buscan ser un reservorio de trabajo: (1) las baterías modeladas como sistemas cerrados [9] y (2) las baterías modeladas como sistemas abiertos [10, 11, 12, 13, 14]. Algunas del tipo (2) usan de manera favorable la interacción con un baño térmico [11, 12, 14], y a diferencia de las del tipo (1), tienen la ventaja de requerir poco control externo del acoplamiento entre la batería y el baño. Además, el estado cargado (*estado activo*) de la batería se puede mantener indefinidamente debido a que es un estado estacionario en la dinámica. Un problema crucial es conocer el costo energético de implementar un ciclo termodinámico de carga y descarga. Es necesario calcular las cantidades termodinámicas relevantes, pues el trabajo requerido para efectuar el proceso podría limitar tanto la eficiencia del dispositivo como el trabajo (*ergotropía*) disponible para ser extraído desde la batería. Este costo energético equivale al trabajo total que hace un agente externo que modula la interacción entre el sistema y el baño por medio de un parámetro dependiente del tiempo. Aún más, no hay que perder de vista la naturaleza disipativa y/o decoherente de la interacción. Determinados el trabajo, el calor y la producción de entropía en el proceso, es posible resolver sobre la eficiencia y la factibilidad operacional de la máquina.

Investigaciones en los últimos años, y algunas bastante recientes, han reportado sobre el

desempeño de máquinas cuánticas térmicas con fines variados [15], asentando así un marco teórico para investigaciones futuras. No obstante, en relación a las baterías cuánticas, sigue abierta la búsqueda de protocolos de carga-descarga y tipos de interacciones más óptimos con el fin de aumentar las ventajas energéticas y el desempeño de estos dispositivos.

Esta tesis surge con el objetivo de estudiar ciclos termodinámicos de carga y descarga de una batería cuántica que interactúa con un baño. Se modelan distintos protocolos de desconexión dependientes del tiempo entre la batería y el baño, los cuales son necesarios para tener acceso a la energía útil almacenada en la batería. Para una potencial aplicabilidad experimental de los ciclos, como batería se ocupa un sistema de variable continua. Actualmente –en las últimas dos décadas– estos sistemas han sido usados activamente en distintas áreas de la mecánica cuántica teórica y aplicada, como por ejemplo, teoría de la información, comunicación cuántica, metrología, entre otros [16, 17, 18, 19, 20, 21].

El texto se organiza en 4 capítulos. En el capítulo 1 se introducen los conceptos y herramientas teóricas del formalismo simpléctico y los estados Gaussianos. Este formalismo se basa en la teoría de matrices de dimensión finita por lo que es un práctico marco teórico para caracterizar a los sistemas de variable continua. En el capítulo 2 se presentan las herramientas teóricas de la teoría termodinámica aplicada a sistemas cuánticos y se presenta un ciclo general tipo desconexión-descarga-conexión-carga. En el capítulo 3 se introduce el modelo de Caldeira-Leggett y se aborda con herramientas de la teoría de sistemas cuánticos abiertos y con las herramientas del formalismo simpléctico la dinámica de un oscilador armónico cuántico que interactúa linealmente con un baño formado por un conjunto de osciladores armónicos. Finalmente, en el Capítulo 4, se implementan ciclos termodinámicos del tipo desconexión-descarga-conexión-carga aplicados al modelo de Caldeira-Leggett donde el oscilador armónico cuantizado representa a la batería, y se reportan los resultados que dan cuenta de las ventajas y desventajas comparativas entre un ciclo y otro.

Capítulo 1

Mecánica cuántica Gaussiana

En este capítulo introducimos los conceptos y herramientas teóricas que están detrás del estudio de los sistemas de variable continua. Estos sistemas están caracterizados por operadores con espectro continuo (infinito). Veremos que el formalismo que se detallará a continuación presenta una ventaja práctica por sobre el tratamiento convencional de la mecánica cuántica definida en el marco de los espacios de Hilbert. A saber, en esta tesis se usarán los términos *mecánica cuántica Gaussiana* y *formalismo simpléctico* como sinónimos, pues abordaremos el estudio particular de sistemas de variable continua caracterizados por estados Gaussianos. Estos estados son de gran interés en distintos campos de la física contemporánea, en especial en óptica cuántica, debido a su fácil accesibilidad y manipulación en un montaje experimental. Veremos en los capítulos siguientes cómo se traducen a este formalismo las ecuaciones dinámicas de un sistema que interactúa con un baño o medio ambiente en procesos disipativos y también el cómo en este formalismo se expresan las cantidades termodinámicas relativas al proceso.

1.1. Sistemas de variable continua y espacio de fase “cuántico”

En mecánica cuántica, un sistema de variable continua (VC) es aquel cuyos grados de libertad relevantes están asociados a operadores con espectro continuo, es decir, sus autovalores son un set de valores continuos en \mathbb{R} . Ejemplos de operadores con espectro continuo son los operadores posición y momentum de una partícula libre pero, de manera más general, lo son un par de operadores auto-adjuntos \hat{Q} y \hat{P} , conocidos como *operadores canónicos* –en analogía al uso del término en mecánica clásica– que satisfacen la *relación de conmutación canónica*^{*},

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar\hat{\mathbb{I}}, \quad (1.1)$$

donde $[\cdot, \cdot]$ corresponde al conmutador entre dos operadores, \hbar es la constante de Planck reducida y $\hat{\mathbb{I}}$ es el operador identidad. Los espacios de Hilbert sobre los cuales estos operadores

^{*}Esta representación de la álgebra considera un set discreto de pares de operadores canónicos o grados de libertad, pero no un continuo de grados de libertad como es el caso de teoría cuántica de campos.

actúan, poseen dimensión infinita [22, 23, 19].

Sistemas compuestos por osciladores armónicos cuánticos son ejemplos representativos de sistemas VC. En el caso de N osciladores armónicos cuánticos no interactuantes se tiene un set de N pares de operadores canónicos $\{(\hat{Q}_k, \hat{P}_k)\}_{k=1}^N$; donde \hat{Q}_k y \hat{P}_k corresponden al operador posición y al operador momentum, respectivamente, del k -ésimo oscilador. La relación (1.1) se puede generalizar para los N pares de operadores canónicos por

$$[\hat{Q}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}\hat{\mathbb{I}}, \quad (1.2)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker. Cada oscilador está caracterizado por un espacio de Hilbert de dimensión infinita \mathcal{H}_k^\dagger sobre el cual actúa el par (\hat{Q}_k, \hat{P}_k) , y el espacio de Hilbert \mathcal{H} que agrupa a los estados de los N osciladores está formado por el producto tensorial de cada espacio \mathcal{H}_k , es decir, $\mathcal{H} = \otimes_{k=1}^N \mathcal{H}_k$. A partir de cada par (\hat{Q}_k, \hat{P}_k) se puede definir un par de operadores no hermíticos $(\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger)$ denominados *operadores escalera*, los cuales están definidos por

$$\hat{a}_k \equiv \sqrt{\frac{m_k\omega_k}{2\hbar}} \left(\hat{Q}_k + \frac{i}{m_k\omega_k} \hat{P}_k \right) \quad \text{y} \quad \hat{a}_k^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m_k\omega_k}{2\hbar}} \left(\hat{Q}_k - \frac{i}{m_k\omega_k} \hat{P}_k \right), \quad (1.3)$$

donde m_k y ω_k corresponden a la masa y la frecuencia, respectivamente, del k -ésimo oscilador. Dada la relación (1.2) se obtiene que el par de operadores escalera satisfacen la relación $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}\hat{\mathbb{I}}$. Con \hat{a}_k y \hat{a}_k^\dagger se define el *operador de número*, $\hat{n}_k \equiv \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$, cuyo set de autoestados $\{|n_k\rangle\}_{n_k \in \mathbb{N}}$, es decir, $\hat{n}_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle$, constituye una base ortonormal para cada espacio \mathcal{H}_k . La acción de \hat{a}_k y \hat{a}_k^\dagger sobre los estados $|n_k\rangle$ se traduce en

$$\hat{a}_k |n_k\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle \quad \text{y} \quad \hat{a}_k^\dagger |n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle, \quad (1.4)$$

que en el caso de \hat{a}_k representa la destrucción de un *cuanto de energía* en el k -ésimo oscilador y en el caso de \hat{a}_k^\dagger representa la creación de un cuanto de energía en el k -ésimo oscilador. El operador Hamiltoniano, $\hat{H}_{\text{osciladores}}$, que actúa sobre el espacio de los N osciladores puede representarse en términos de los operadores canónicos o, equivalentemente, en términos de los operadores escalera:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{osciladores}} &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{\hat{P}_k^2}{2m_k} + \frac{m_k\omega_k^2}{2} \hat{Q}_k^2 \right) \\ &= \sum_{k=1}^N \hbar\omega_k \left(\hat{n}_k + \frac{1}{2}\hat{\mathbb{I}} \right). \end{aligned} \quad (1.5)$$

En vista de la segunda igualdad[‡] en (1.5) se desprende que $\hat{H}_{\text{osciladores}}$ es diagonal en la base formada por cada una de las bases ortonormales $\{|n_k\rangle\}_{n_k \in \mathbb{N}}$ ($k = 1, \dots, N$), es decir, es diagonal en la base $\{|n_1\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle\}_{n_1, \dots, n_N \in \mathbb{N}}$.

[†]En representación de coordenadas las funciones que forman parte de \mathcal{H}_k son las funciones cuadrado integrables definidas en \mathbb{R} y con valores en \mathbb{C} .

[‡]La segunda igualdad en (1.5) es apropiada para la descripción en el contexto de óptica cuántica de N modos no interactuantes del campo electromagnético donde \hat{a}_k y \hat{a}_k^\dagger destruyen y crean fotones, respectivamente, en el k -ésimo modo.

En general, cuando se cuenta con N pares de operadores canónicos, estos se pueden agrupar en un vector de operadores

$$\hat{\mathbf{r}} \equiv (\hat{Q}_1, \hat{P}_1, \dots, \hat{Q}_N, \hat{P}_N)^T, \quad (1.6)$$

con el cual se pueden escribir las relaciones de conmutación canónicas (1.2) de manera compacta como

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{r}}^T] \equiv \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}^T - (\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}^T)^T = i\hbar\mathbf{\Omega}, \quad (1.7)$$

donde

$$\mathbf{\Omega} \equiv \bigoplus_{k=1}^N \Omega_1 = \begin{pmatrix} \Omega_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \Omega_1 \end{pmatrix}; \quad \text{con} \quad \Omega_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

A $\mathbf{\Omega}$ se le conoce como la matriz *forma simpléctica*[§]. Es directo observar que $\mathbf{\Omega}$ es una matriz de dimensión $2N \times 2N$, anti-simétrica y real [23].

Toda la información física de un sistema cuántico VC con observables (1.6) está contenida en su *estado cuántico*. Este estado puede ser representado por un *operador densidad*, $\hat{\rho}$, que es semi-definido positivo[§], con $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$ y que actúa sobre el mismo espacio de Hilbert que los operadores (1.6) [26, 19]. Cada operador $\hat{\rho}$ se corresponde uno a uno con una de sus funciones multivariadas llamadas *funciones característica s-ordenada*, χ_s , las cuales están definidas sobre un espacio simpléctico real $\Gamma \equiv (\mathbb{R}^{2N}, \mathbf{\Omega})$ de dimensión $2N$ y dotado de la estructura $\mathbf{\Omega}$ [17, 27]:

$$\chi_s(\mathbf{x}) = \text{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{D}(-\mathbf{x}) \right] \exp(s\|\mathbf{x}\|^2/2), \quad (1.9)$$

donde $\hat{D}(-\mathbf{x}) \equiv \exp(-i\mathbf{x}^T \mathbf{\Omega} \hat{\mathbf{r}})$ es el operador desplazamiento de Weyl, $\|\cdot\|$ la norma euclidiana y $\mathbf{x} \in \Gamma$. Equivalentemente, $\hat{\rho}$ puede ser escrito en términos de (1.9) como

$$\hat{\rho} = \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{\mathbb{R}^{2N}} \chi_s(\mathbf{x}) \hat{D}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (1.10)$$

con $d\mathbf{x} = dQ_1 dP_1 \dots dQ_N dP_N$. La familia de funciones características (1.9) está relacionada por medio de la transformada de Fourier con las *funciones de cuasi-probabilidad* definidas en Γ [17, 27],

$$W_s(\mathbf{x}) = \frac{1}{2^N \pi^{2N}} \int_{\mathbb{R}^{2N}} \exp(i\mathbf{x}'^T \mathbf{\Omega} \mathbf{x}) \chi_s(\mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (1.11)$$

las cuales están normalizadas a 1, sin embargo, no se comportan precisamente como una distribución de probabilidad, pues dependiendo del valor de s , pueden aceptar valores negativos o ser singulares en ciertos puntos de Γ . Algunos ejemplos de funciones de cuasi-probabilidad son la función Q de Husimi ($s = -1$); la función de Wigner ($s = 0$) y la representación P singular ($s = 1$). Cabe señalar (y remarcar) que ambas familias de funciones, (1.9) y (1.11),

[§]La naturaleza de los sistemas VC radica en las relaciones de conmutación canónicas (1.7) acompañadas de una forma simpléctica $\mathbf{\Omega}$. Sistemas de N bosones con pares de operadores canónicos que satisfacen (1.7), constituyen sistemas VC [19, 24, 18].

[§]Sea un operador \hat{O} definido sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} , $\hat{O} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Luego, \hat{O} se dice semi-definido positivo si $\forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ y $|\phi\rangle \neq 0$, $\langle \hat{O}\phi | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{O} | \phi \rangle \geq 0$ y los autovalores de \hat{O} son reales y no negativos [25].

ofrecen una descripción igualmente completa de cualquier estado cuántico, al igual que los operadores densidad definidos sobre un espacio de Hilbert. El espacio Γ es denominado *espacio de fase cuántico* en analogía al espacio de fase de Liouville de la mecánica clásica Hamiltoniana, no obstante, en el caso cuántico no se puede describir al estado de un sistema en términos de un punto del espacio de fase debido a la prevalencia del principio de incertidumbre de Heisenberg. Las variables que conforman Γ son los autovalores de los operadores canónicos $\hat{\mathbf{r}}$, y las cantidades más relevantes que caracterizan a las funciones características y a las distribuciones de cuasi-probabilidad son los momentos estadísticos del estado cuántico. Un vector de primeros momentos estadísticos de un estado $\hat{\rho}$ se define por

$$\mathbf{r} \equiv \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle_{\hat{\rho}} = \left(\langle \hat{Q}_1 \rangle_{\hat{\rho}}, \langle \hat{P}_1 \rangle_{\hat{\rho}}, \dots, \langle \hat{Q}_N \rangle_{\hat{\rho}}, \langle \hat{P}_N \rangle_{\hat{\rho}} \right)^T, \quad (1.12)$$

es decir, es el vector formado por los valores de expectación de los operadores canónicos con respecto al estado $\hat{\rho}$: $\langle \cdot \rangle_{\hat{\rho}} = \text{Tr}[\cdot \hat{\rho}]$. Una matriz de segundos momentos σ , también llamada *matriz de covarianza* (MC), se define por

$$\sigma_{ij} \equiv \langle \{ \hat{r}_i - \langle \hat{r}_i \rangle_{\hat{\rho}}, \hat{r}_j - \langle \hat{r}_j \rangle_{\hat{\rho}} \} \rangle_{\hat{\rho}}, \quad (1.13)$$

donde $\{ \cdot, \cdot \}$ es el anticonmutador entre dos operadores. Los elementos diagonales de σ son las varianzas de los operadores canónicos, mientras que los elementos no diagonales corresponden a las correlaciones entre los operadores canónicos. Para que una MC caracterice a un operador densidad $\hat{\rho}$ con información física, esta debe satisfacer la relación de Robertson-Schrödinger,

$$\sigma + i\hbar\Omega \geq 0, \quad \P \quad (1.14)$$

la cual surge de la semi-positividad de $\hat{\rho}$ y de preservar las relaciones de conmutación canónicas (1.2). La desigualdad (1.14) es equivalente a satisfacer el principio de incertidumbre de Heisenberg, el cual también es conocido como *la desigualdad de Heisenberg-Weyl-Kennard* para operadores canónicos [28, 29]. De la definición (1.13) se desprende que las MC's son matrices simétricas y de la desigualdad (1.14) se desprende que son matrices semi-definidas positivas: $\sigma \geq 0$. Es posible definir momentos estadísticos de orden superior, no obstante, a efectos de esta tesis no son relevantes.

1.2. Estados Gaussianos

Existe una clase particular de estados que pueden ser descritos completamente por sus primeros y segundos momentos [(1.12) y (1.13)]. Estos se denominan estados Gaussianos y se pueden definir como el conjunto de estados con funciones características Gaussianas y funciones de cuasi-probabilidad Gaussianas [17, 24]. En particular, para $s = 0$, la función característica de Wigner [30, 18] de un estado Gaussiano con primeros momentos \mathbf{r} y segundos momentos σ se expresa por

$$\chi_0^G(\mathbf{x}) = \exp \left[-\frac{1}{4} \mathbf{x}^T \Omega^T \sigma \Omega \mathbf{x} \right] \exp [i \mathbf{x}^T \Omega^T \mathbf{r}] \quad (1.15)$$

^{\P}Una matriz hermítica \mathbf{M} ($\mathbf{M} = \mathbf{M}^*$) de $2N \times 2N$; donde $(\cdot)^*$ denota el transpuesto conjugado, se dice semi-definida positiva si $\forall \vec{\zeta} \in \mathbb{C}^{2N}$ y $\vec{\zeta} \neq \vec{0}$, $\vec{\zeta}^* \mathbf{M} \vec{\zeta} \geq 0$.

y la función de cuasi-probabilidad de Wigner [31, 18] se expresa por

$$W_0^G(\mathbf{x}) = \frac{2^N}{\pi^N \sqrt{\det \sigma}} \exp \left[-(\mathbf{x} - \mathbf{r})^T \sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{r}) \right]. \quad (1.16)$$

Si el estado de un sistema, S , es un estado Gaussiano, $\hat{\rho}_S^G$, entonces el estado reducido de un subsistema SS contenido en S es también un estado Gaussiano, $\hat{\rho}_{SS}^G \equiv \text{Tr}_{S \setminus SS}[\hat{\rho}_S^G]$, donde $\text{Tr}_{S \setminus SS}[\cdot]$ denota la traza parcial sobre los grados de libertad del subsistema $S \setminus SS$, a saber, los grados de libertad que forman parte de S , pero que no son parte de SS .

Ejemplos de estados Gaussianos en el contexto de teoría de campos son los estados coherentes y los estados comprimidos; recurrentes en óptica cuántica [32, 33]. Lo son también todos los estados basales y térmicos de sistemas con Hamiltonianos cuadráticos y acotados inferiormente, $\hat{H}^{(2)}$. Un Hamiltoniano cuadrático[¶], $\hat{H}^{(2)}$, es aquel que puede ser expresado como un polinomio de orden dos en los operadores canónicos [30, 23]. En términos del vector $\hat{\mathbf{r}}$ (1.6), la forma más general en que se puede escribir (salvo una constante) es

$$\hat{H}^{(2)} = \hat{\mathbf{r}}^T \mathbf{H} \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{r}}^T \mathbf{r}_0, \quad (1.17)$$

donde $\mathbf{r}_0 \in \Gamma$ y \mathbf{H} es una matriz simétrica de dimensión $2N \times 2N$ conocida como *matriz Hamiltoniana*. En particular, un Hamiltoniano cuadrático y acotado inferiormente, $\hat{H}^{(2)}$, tiene la forma de (1.17), pero su matriz Hamiltoniana es definida positiva, $\mathbf{H} > 0$. Decir que \mathbf{H} es definida positiva es equivalente a decir que el operador Hamiltoniano es acotado inferiormente, luego, ambas condiciones garantizan la estabilidad del sistema. Un ejemplo de Hamiltoniano cuadrático acotado inferiormente es el Hamiltoniano de N osciladores no interactuantes (1.5), con término lineal en los operadores canónicos nulo [segundo sumando en (1.17)]. Los estados térmicos con Hamiltonianos $\hat{H}^{(2)}$ se expresan por

$$\hat{\rho}_{\text{tco}} = \frac{\exp \left(-\beta \hat{H}^{(2)} \right)}{Z}, \quad (1.18)$$

donde $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$ es el inverso de la temperatura T del estado, k_B es la constante de Boltzmann y $Z \equiv \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \hat{H}^{(2)} \right) \right]$. Cuando $\beta \rightarrow +\infty$, entonces $\hat{\rho}_{\text{tco}}$ tiende al estado basal del sistema. Estos estados son comunes en la dinámica de un sistema abierto que interactúa linealmente con un medio ambiente y serán de gran interés en esta tesis.

1.3. Transformaciones unitarias y grupo simpléctico

La acción de las transformaciones unitarias sobre un estado cuántico definido en un espacio de Hilbert está representada por un set de operadores lineales que transforman al estado en otro estado contenido en el espacio. Cada operador unitario se corresponde con una matriz simpléctica real; existe una relación uno a uno. La acción de un operador unitario \hat{U} sobre

[¶]Los estados Gaussianos no solo aplican para sistemas de osciladores y sistemas de bosones, sino también para sistemas fermiónicos donde los observables de interés satisfacen *las relaciones de anticonmutación canónicas* y cuyos Hamiltonianos son cuadráticos [34].

un estado $\hat{\rho}$ en un espacio de Hilbert es mapeada a la acción de una matriz simpléctica \mathbf{S} (a.k.a. *transformación simpléctica*) sobre los primeros y segundos momentos del estado. Esto último se puede representar como:

$$\hat{\rho}' = \hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger \longrightarrow \begin{cases} \mathbf{r}' = \mathbf{S}\mathbf{r} \\ \sigma' = \mathbf{S}\sigma\mathbf{S}^\mathbf{T} \end{cases}, \quad (1.19)$$

donde $\hat{\rho}'$ es el operador densidad transformado, \mathbf{r}' es el vector de primeros momentos transformado y σ' es la MC transformada. Las transformaciones simplécticas que actúan sobre un espacio de fase de dimensión $2N$ forman el *grupo simpléctico*, el cual lo denotaremos por $Sp(2N, \mathbb{R}) \equiv \{\mathbf{S} \text{ tales que } \mathbf{S}\boldsymbol{\Omega}\mathbf{S}^\mathbf{T} = \mathbf{S}^\mathbf{T}\boldsymbol{\Omega}\mathbf{S} = \boldsymbol{\Omega}\}$ y cuya dimensión es $N(2N + 1)$. Las matrices \mathbf{S} son cuadradas de dimensión $(2N \times 2N)$, invertibles y con determinantes $\det(\mathbf{S}) = +1$.

A las transformaciones unitarias representadas por operadores lineales cuyos exponentes son polinomios de orden dos en los operadores canónicos se les llama *transformaciones Gaussianas*. Estas son operaciones cuánticas que mapean estados Gaussianos en estados Gaussianos [19, 23], dicho de otra manera, son transformaciones que preservan las relaciones de conmutación canónicas y la naturaleza Gaussiana del estado. Entonces, como todo operador unitario posee su contraparte simpléctica, toda transformación Gaussiana de un estado Gaussiano quedará completamente representada por la transformación de sus primeros y segundos momentos por medio de una matriz simpléctica. Ejemplos de transformaciones simplécticas Gaussianas son las rotaciones [30, 35], las evoluciones temporales generadas por Hamiltonianos cuadráticos acotados inferiormente [36, 23] y, de gran importancia en óptica cuántica, lo son las transformaciones aplicadas por divisores de haces de luz (*beam splitters*), desplazadores de fase (*phase shifters*) y operadores *squeeze* [30, 37, 33, 32].

Un resultado relativo a la utilidad de las matrices simplécticas es el enunciado por el teorema de Williamson [38, 39, 26], el cual aplica a matrices reales, cuadradas y definidas positivas:

Teorema de Williamson: Sea \mathbf{M} una matriz real de $2N \times 2N$ definida positiva. Luego, siempre existe una matriz $\mathbf{S} \in Sp(2N, \mathbb{R})$ que *diagonaliza simplécticamente* a \mathbf{M} , es decir,

$$\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{S}^\mathbf{T} = \bigoplus_{j=1}^N \begin{pmatrix} m_j & 0 \\ 0 & m_j \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

donde $\{m_i\}_{i \geq 1}$ son los *autovalores simplécticos* de \mathbf{M} .

A la matriz diagonal en (1.20) se le conoce como *forma normal de Williamson* y cada autovalor simpléctico m_j puede ser directamente calculado diagonalizando la matriz $i\boldsymbol{\Omega}\mathbf{M}$,

pues sus autovalores positivos corresponden a $\{m_j\}_{j \geq 1}$:

$$\begin{aligned}
i\Omega\mathbf{M} &= i\Omega\mathbf{S}^{-1} \bigoplus_{j=1}^N \begin{pmatrix} m_j & 0 \\ 0 & m_j \end{pmatrix} (\mathbf{S}^T)^{-1} \\
&= i\mathbf{S}^T \Omega \bigoplus_{j=1}^N \begin{pmatrix} m_j & 0 \\ 0 & m_j \end{pmatrix} (\mathbf{S}^T)^{-1} \\
&= \mathbf{S}^T \hat{U}^\dagger \left[\bigoplus_{j=1}^N \begin{pmatrix} m_j & 0 \\ 0 & -m_j \end{pmatrix} \right] \hat{U} (\mathbf{S}^T)^{-1},
\end{aligned} \tag{1.21}$$

con $\hat{U} = \bigoplus_{j=1}^N \hat{u}$ y donde

$$\hat{u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix}$$

es la transformación unitaria que diagonaliza a Ω_1 (1.8):

$$\hat{u}\Omega_1\hat{u}^\dagger = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}.$$

El resultado (1.20) nos dice que toda matriz Hamiltoniana $\mathbf{H} > 0$ puede ser llevada a su forma normal de Williamson por medio de la acción de una matriz simpléctica $\mathbf{S}_\mathbf{H}$:

$$\mathbf{S}_\mathbf{H}\mathbf{H}\mathbf{S}_\mathbf{H}^T = \bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2}, \tag{1.22}$$

donde $\{\omega_j/2\}_{j \geq 1}$ son los autovalores simplécticos de \mathbf{H} y $\mathbb{I}_{2 \times 2}$ es la matriz identidad de dimensión 2×2 [23]. El operador unitario $\hat{U}_\mathbf{H}$, que se corresponde con la matriz simpléctica $(\mathbf{S}_\mathbf{H}^T)^{-1}$, es aquel que diagonaliza en *la base de los modos normales* a un operador Hamiltoniano *puramente* cuadrático acotado inferiormente

$$\hat{H}_\mathbf{p}^{(2)} = \hat{\mathbf{r}}^T \mathbf{H} \hat{\mathbf{r}} \tag{1.23}$$

cuya matriz Hamiltoniana es \mathbf{H} [ver Hamiltoniano (1.17)], es decir, en la base de los modos normales el Hamiltoniano se expresa por

$$\hat{H}_\mathbf{p}^{(2)} = \hat{\mathbf{r}}'^T \left(\bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2} \right) \hat{\mathbf{r}}' \tag{1.24}$$

con $\hat{\mathbf{r}}' = (\mathbf{S}_\mathbf{H}^T)^{-1} \hat{\mathbf{r}} = \hat{U}_\mathbf{H}^\dagger \hat{\mathbf{r}} \hat{U}_\mathbf{H}$ los operadores canónicos de la base de los modos normales y donde las frecuencias $\{\omega_j\}_{j \geq 1}$ que forman parte de los autovalores simplécticos de \mathbf{H} se reconocen también como las frecuencias de los modos normales [40]. El lado derecho en (1.24) es el Hamiltoniano de N osciladores armónicos libres con operadores canónicos $\hat{\mathbf{r}}'$.

El resultado (1.22) permite demostrar que los primeros momentos de un estado térmico,

$$\hat{\tau} = \frac{\exp\left(-\beta \hat{H}_\mathbf{p}^{(2)}\right)}{\text{Tr}\left[\exp\left(-\beta \hat{H}_\mathbf{p}^{(2)}\right)\right]}; \tag{1.25}$$

con inverso de la temperatura β y Hamiltoniano puramente cuadrático, $\hat{H}_p^{(2)}$ (1.23), son nulos:

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left[\frac{\hat{\mathbf{r}} \exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \right] &= \frac{1}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \text{Tr} \left[\hat{\mathbf{r}} \exp \left(-\beta \hat{\mathbf{r}}'^T \bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2} \hat{\mathbf{r}}' \right) \right] \\
&= \frac{1}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \text{Tr} \left[\mathbf{S}_H^T \hat{\mathbf{r}}' \exp \left(-\beta \hat{\mathbf{r}}'^T \bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2} \hat{\mathbf{r}}' \right) \right] \\
\Rightarrow \text{Tr} \left[\frac{\hat{r}'_j \exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \right] &= \frac{\sum_l (\mathbf{S}_H^T)_{jl}}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \text{Tr} \left[\hat{r}'_l \exp \left(-\beta \hat{\mathbf{r}}'^T \bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2} \hat{\mathbf{r}}' \right) \right] \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{1.26}$$

pues $\text{Tr} \left[\hat{r}'_l \exp \left(-\beta \hat{\mathbf{r}}'^T \bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2} \hat{\mathbf{r}}' \right) \right] = 0 \forall l \in [1, \dots, 2N]$ [ver por ejemplo la definición de los operadores en (1.3) y el cómo estos actúan sobre la base de número en (1.4)]. Por otra parte, la MC $\sigma_{\hat{\tau}}$ del estado $\hat{\tau}$ (1.25) puede ser determinada a partir de la matriz simpléctica \mathbf{S}_H en (1.22) y su forma normal de Williamson (1.20). En efecto,

$$\begin{aligned}
\sigma_{\hat{\tau}} &= \text{Tr} \left[\frac{\{\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{r}}^T\} \exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \right] \\
&= \text{Tr} \left[\frac{\hat{U}_H^\dagger \{\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{r}}^T\} \hat{U}_H \exp \left(-\beta \hat{\mathbf{r}}^T \left(\bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2} \right) \hat{\mathbf{r}} \right)}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \right] \\
&= \text{Tr} \left[\frac{\{\mathbf{S}_H^T \hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{r}}^T \mathbf{S}_H\} \exp \left(-\beta \hat{\mathbf{r}}^T \left(\bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2} \right) \hat{\mathbf{r}} \right)}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \right] \\
&= \mathbf{S}_H^T \text{Tr} \left[\frac{\{\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{r}}^T\} \exp \left(-\beta \hat{\mathbf{r}}^T \left(\bigoplus_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} \mathbb{I}_{2 \times 2} \right) \hat{\mathbf{r}} \right)}{\text{Tr}[\exp \left(-\beta \hat{H}_p^{(2)} \right)]} \right] \mathbf{S}_H \\
&= \mathbf{S}_H^T \prod_{j=1}^N [1 - \exp(-\beta \hbar \omega_j)] \text{Tr} \left[\{\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{r}}^T\} \left(\bigotimes_{j=1}^N \left(\sum_{n_j=0}^N \exp(-\beta \hbar \omega_j \hat{n}_j) \right) \right) \right] \mathbf{S}_H \\
&= \mathbf{S}_H^T \sigma_\beta \mathbf{S}_H,
\end{aligned} \tag{1.27}$$

donde $\hat{U}_H^\dagger \hat{\mathbf{r}} \hat{U}_H = \mathbf{S}_H^T \hat{\mathbf{r}}$ y con

$$\sigma_\beta \equiv \bigoplus_{j=1}^N \begin{pmatrix} e^{-\beta \hbar \omega_j + 1} & 0 \\ e^{-\beta \hbar \omega_j - 1} & 0 \\ 0 & e^{-\beta \hbar \omega_j + 1} \\ 0 & e^{-\beta \hbar \omega_j - 1} \end{pmatrix}$$

la forma normal de Williamson de $\sigma_{\hat{\tau}}$, pues el teorema de Williamson (1.20) también aplica a las MC's. La forma normal de Williamson de toda MC que caracteriza a un estado Gaussiano

se expresa por

$$\mathbf{W} = \bigoplus_{j=1}^N \begin{pmatrix} w_j & 0 \\ 0 & w_j \end{pmatrix}, \quad (1.28)$$

con

$$w_j \geq 1 \quad \forall j. \quad (1.29)$$

Que $w_j \geq 1$ es una forma equivalente de enunciar que $\mathbf{W} + i\hbar\mathbf{\Omega} \geq 0$, lo cual es a la vez equivalente a la relación de Robertson-Schrödinger (1.14).

1.3.1. Evolución temporal de un estado cuántico Gaussiano

Cuando el sistema con operadores canónicos contenidos en el vector $\hat{\mathbf{r}}$ (1.6) –que describiremos como $\hat{\mathbf{r}}(0)$ – posee un Hamiltoniano puramente cuadrático $\hat{H}(t)$ (en el cuadro de Schrödinger) del tipo (1.23) con dependencia temporal en una función escalar, entonces su evolución temporal está caracterizada por un operador de evolución temporal Gaussiano $\hat{U}(t)$ o, equivalentemente, por una matriz de evolución simpléctica $\mathbf{S}(t)$. Para un estado Gaussiano con primeros y segundos momentos a tiempo inicial $t = 0$, $\mathbf{r}(0)$ y $\sigma(0)$, respectivamente, su evolución temporal queda determinada por las evoluciones temporales de $\mathbf{r}(0)$ y $\sigma(0)$ [ver (1.19)], es decir,

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{S}(t)\mathbf{r}(0) \quad \text{y} \quad \sigma(t) = \mathbf{S}(t)\sigma(0)\mathbf{S}(t)^T. \quad (1.30)$$

En el cuadro de Heisenberg el vector $\hat{\mathbf{r}}(0)$ transforma temporalmente como $\hat{\mathbf{r}}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{\mathbf{r}}(0)\hat{U}(t)$, y dada la correspondencia entre $\hat{U}(t)$ y $\mathbf{S}(t)$, la transformación es equivalente a $\hat{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{S}(t)\hat{\mathbf{r}}(0)$. Cada operador $\hat{\mathbf{r}}_j(t)$ ($j = 1, \dots, 2N$) obedece la ecuación de movimiento de Heisenberg

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{r}}_j(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathbf{r}}_j(t), \hat{U}^\dagger(t)\hat{H}(t)\hat{U}(t) \right] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k,l} \mathbf{H}_{kl}(t) [\hat{\mathbf{r}}_j(t), \hat{\mathbf{r}}_k(t)\hat{\mathbf{r}}_l(t)] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k,l} \mathbf{H}_{kl}(t) ([\hat{\mathbf{r}}_j(t), \hat{\mathbf{r}}_k(t)]\hat{\mathbf{r}}_l(t) + \hat{\mathbf{r}}_k(t)[\hat{\mathbf{r}}_j(t), \hat{\mathbf{r}}_l(t)]) \\ &= \sum_{k,l} \mathbf{\Omega}_{jk}\mathbf{H}_{kl}(t)\hat{\mathbf{r}}_l(t) + \sum_{k,l} \mathbf{\Omega}_{jl}\mathbf{H}_{kl}\hat{\mathbf{r}}_k(t) \\ &= 2 \sum_{k,l} \mathbf{\Omega}_{jk}\mathbf{H}_{kl}\hat{\mathbf{r}}_l(t) \\ \implies \left[\frac{d\mathbf{S}(t)}{dt} - 2\mathbf{\Omega}\mathbf{H}(t)\mathbf{S}(t) \right] \hat{\mathbf{r}}(0) &= 0, \end{aligned} \quad (1.31)$$

es decir, $\mathbf{S}(t)$ satisface la ecuación tipo ecuación Schrödinger

$$\frac{d\mathbf{S}(t)}{dt} = 2\mathbf{\Omega}\mathbf{H}(t)\mathbf{S}(t), \quad (1.32)$$

con $\mathbf{H}(t)$ la matriz Hamiltoniana que concentra la dependencia temporal. La solución de (1.32) es

$$\begin{aligned}\mathbf{S}(t) &= \hat{\mathcal{T}} \exp \left(\int_0^t dt' 2\mathbf{\Omega H}(t') \right) \\ &\equiv 1 + \sum_{n=1}^{\infty} 2^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{\Omega H}(t_1) \mathbf{\Omega H}(t_2) \cdots \mathbf{\Omega H}(t_n),\end{aligned}\tag{1.33}$$

con $\hat{\mathcal{T}}$ el operador de orden temporal que da cuenta del orden temporal que hay que mantener en el integrando cuando $[\mathbf{\Omega H}(t), \mathbf{\Omega H}(t')] \neq 0$ con $t \neq t'$. De manera análoga, el operador unitario $\hat{U}(t)$ satisface la ecuación de Schrödinger

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t),\tag{1.34}$$

cuya solución es

$$\begin{aligned}\hat{U}(t) &= \hat{\mathcal{T}} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \hat{H}(t) \right) \\ &\equiv 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n);\end{aligned}\tag{1.35}$$

donde esta última serie es conocida como la *serie de Dyson* [41]. Equivalentemente a la evolución (1.30), el estado Gaussiano representado por el operador densidad $\hat{\rho}_G(0)$ del sistema con Hamiltoniano $\hat{H}(t)$ evoluciona según

$$\hat{\rho}_G(t) = \hat{U}(t) \hat{\rho}_G(0) \hat{U}^\dagger(t).\tag{1.36}$$

Las soluciones (1.33) y (1.35) son series infinitas. Sin embargo, en el caso de (1.33), las matrices son de dimensión finita ($2N \times 2N$), mientras que en (1.35), los operadores son de dimensión infinita. En una simulación computacional de una evolución temporal, el cálculo de $\mathbf{S}(t)$ no requiere un truncamiento de la dimensión del espacio que sí requiere el cálculo de $\hat{U}(t)$.

1.4. Aspectos relevantes del capítulo

A modo de resumen, vale la pena destacar los siguientes aspectos del presente capítulo que serán de utilidad en los capítulos siguientes:

- El formalismo simpléctico es equivalente al formalismo de espacios de Hilbert de la mecánica cuántica.
- Un estado Gaussiano queda totalmente caracterizado por sus primeros y segundos momentos estadísticos.

- El estado reducido resultante de trazar parcialmente a un estado Gaussiano, es un estado Gaussiano.
- Los estados térmicos generados por Hamiltonianos cuadráticos y acotados inferiormente son un caso particular de estados Gaussianos.
- Las transformaciones unitarias Gaussianas de un estado Gaussiano se pueden representar por la acción de una matriz simpléctica sobre los primeros y segundos momentos del estado.
- Toda transformación unitaria Gaussiana preserva la naturaleza Gaussiana de un estado Gaussiano.

Capítulo 2

Termodinámica en sistemas cuánticos

En este capítulo introducimos el formalismo de la teoría termodinámica aplicada a sistemas cuánticos. Se presenta el concepto de *batería cuántica* y se detallan las cantidades relevantes asociadas a su caracterización termodinámica. Se presenta y estudia un tipo particular de batería: *batería disipativa*, y se describen la carga y la descarga de esta por medio de un ciclo termodinámico. A lo largo del capítulo se considerarán sistemas generales –no se tratarán solamente sistemas VC o Gaussianos–, no obstante, al finalizar, haremos la conexión con el formalismo simpléctico y los estados Gaussianos tal de fijar las herramientas de cálculo que serán usadas en el Capítulo 4 para caracterizar la energética y desempeño del ciclo de carga y descarga de una batería cuántica disipativa particular.

2.1. Estados pasivo y activo

Del punto de vista termodinámico, la extracción de trabajo desde un sistema ha sido un tema de especial atención e interés. La termodinámica cuántica [15, 42], actualmente en activo desarrollo, busca explicar y/o entender cuáles son los recursos cuánticos de un sistema microscópico que favorecen la generación de energía útil, en contraste a las cualidades y límites clásicos ya conocidos [43].

Un área activa dentro de la termodinámica cuántica, motivada por los procesos de miniaturización y complejización que ha experimentado la tecnología en las últimas décadas, es el estudio de sistemas capaces de almacenar energía para su uso posterior. A estos sistemas se les conoce como *baterías cuánticas* [8], las cuales explotan la naturaleza cuántica de las correlaciones, coherencias y entrelazamiento de estados cuánticos para optimizar el desempeño de carga/descarga y la cantidad de energía almacenada.

Una batería transita entre estados con carga y estados vacíos de carga o energía. Al estado $\hat{\rho}$ de un sistema del cual no se puede extraer energía por medio de una variación cíclica de un parámetro de una fuente externa de trabajo, se le conoce como *estado pasivo*. Por el contrario, cuando es posible extraer trabajo del estado de un sistema mediante procesos cíclicos unitarios, se le llama *estado activo* [44, 45]. En este contexto, un proceso cíclico se

entiende como el proceso en que originalmente un sistema que se encuentra aislado, en un instante de tiempo $t = 0$ se acopla por medio de un potencial dependiente del tiempo $\hat{V}_S(t)$ a una fuente de trabajo y luego se desacopla de ella después de un periodo de tiempo τ , es decir, $\hat{V}_S(0) = \hat{V}_S(\tau) = 0$ [46].

Los estados pasivos, $\hat{\rho}$, de un sistema caracterizado por un Hamiltoniano \hat{H}_S cumplen dos propiedades: 1) $[\hat{\rho}, \hat{H}_S] = 0$, es decir, $\hat{\rho}$ conmuta con \hat{H}_S y en consecuencia el operador densidad es diagonal en la base de autoenergías $\{|E_i\rangle\}_{i \geq 1}$ de \hat{H}_S y 2) las poblaciones $\{r_i\}_{i \geq 1}$ del estado, tales que $\hat{\rho} = \sum_{i \geq 1} r_i |E_i\rangle\langle E_i|$, están ordenadas de manera decreciente, $r_1 \geq r_2 \geq r_3 \geq \dots$, dado que los autovalores $\{E_i\}_i$ de \hat{H}_S están ordenados de forma creciente, $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq \dots$, es decir, los autoestados de más baja energía poseen mayor población que los autoestados de más alta energía [47, 48, 49].

2.1.1. Ergotropía

La energía extraíble de un estado activo, $\hat{\rho}_{\text{act}} = \sum_{k \geq 1} r_k |r_k\rangle\langle r_k|$, de una batería cuántica con Hamiltoniano $\hat{H}_S = \sum_{k \geq 1} E_k |E_k\rangle\langle E_k|$ puede ser cuantificada. La cantidad máxima de trabajo que puede ser extraída desde el sistema en un proceso cíclico unitario se denomina *ergotropía* [47, 11, 50]. Esta cantidad máxima de energía extraída es el resultado de una optimización sobre todas las posibles operaciones unitarias, $\hat{U} = \hat{\mathcal{T}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int dt [\hat{H}_S + \hat{V}_S(t)]\right)$, que dependen de un potencial de acoplamiento $\hat{V}_S(t)$ activo durante lo que dura la extracción. Tales transformaciones conservan la *entropía de von Neumann* [51, 52] del estado activo de la batería, $S(\hat{\rho}_{\text{act}}) \equiv -k_B \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{act}} \ln \hat{\rho}_{\text{act}}]$, como también los autovalores $\{r_k\}_{k \geq 1}$ de $\hat{\rho}_{\text{act}}$. En efecto, la ergotropía, \mathcal{W} , de una batería se define por

$$\mathcal{W}(\hat{\rho}_{\text{act}}, \hat{H}_S) \equiv \max_{\hat{U}} \text{Tr} \left[\hat{H}_S \left(\hat{\rho}_{\text{act}} - \hat{U} \hat{\rho}_{\text{act}} \hat{U}^\dagger \right) \right], \quad (2.1)$$

la cual depende solo del estado activo y del Hamiltoniano de la batería. $\mathcal{W}(\hat{\rho}_{\text{act}}, \hat{H}_S)$ está acotada superiormente por $\mathcal{W}(\hat{\rho}_{\text{act}}^*)$: $\mathcal{W}(\hat{\rho}_{\text{act}}^*, \hat{H}_S) \geq \mathcal{W}(\hat{\rho}_{\text{act}}, \hat{H}_S)$, donde el estado pasivo asociado a $\hat{\rho}_{\text{act}}^*$ es térmico. Dado que el máximo en (2.1) se obtiene con $\hat{U} = \sum_{k \geq 1} |E_k\rangle\langle r_k|$ y el estado pasivo en que queda la batería luego de la extracción es $\hat{\rho}_{\text{pas}} \equiv \hat{U} \hat{\rho}_{\text{act}} \hat{U}^\dagger = \sum_{k \geq 1} r_k |E_k\rangle\langle E_k|$, entonces la ergotropía se puede expresar por

$$\mathcal{W} = \sum_{j,k} r_j E_k (|\langle r_j | E_k \rangle|^2 - \delta_{jk}). \quad (2.2)$$

De (2.2) podemos ver que $\mathcal{W} > 0$ si $\hat{\rho}_{\text{act}}$ presenta inversión de población o coherencias cuánticas. En resumen, la batería se encuentra en un estado pasivo si su ergotropía es nula y en un estado activo si su ergotropía es positiva.

Cuando la batería es un sistema VC en un estado activo $\hat{\rho}_{\text{act}}$ (no necesariamente Gaussiano) y se ocupa una transformación Gaussiana que maximiza la extracción de trabajo desde $\hat{\rho}_{\text{act}}$, a la energía extraída se le llama *ergotropía Gaussiana*, \mathcal{W}_G [53, 54, 12]. En particular, la \mathcal{W}_G extraída desde un estado activo Gaussiano $\hat{\rho}_G^{\text{act}}$ se expresa por

$$\mathcal{W}_G(\hat{\rho}_G^{\text{act}}, \hat{H}_S) = \text{Tr} \left[\hat{H}_S \hat{\rho}_G^{\text{act}} \right] - \min_{\hat{U}_G} \text{Tr} \left[\hat{U}_G \hat{\rho}_G^{\text{act}} \hat{U}_G^\dagger \hat{H}_S \right], \quad (2.3)$$

donde la minimización se aplica sobre todas las transformaciones unitarias Gaussianas. Cuando el Hamiltoniano \hat{H}_S es puramente cuadrático, la energía del estado $\hat{\rho}_G^{\text{act}}$ (considerando primeros momentos nulos) se puede expresar en términos de la matriz de covarianza σ_S^{act} (asociada a $\hat{\rho}_G^{\text{act}}$) y la matriz Hamiltoniana \mathbf{H}_S (asociada a \hat{H}_S), pues*

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H}_S \rangle_{\hat{\rho}_G^{\text{act}}} &= \text{Tr} \left[\hat{H}_S \hat{\rho}_G^{\text{act}} \right] \\
&= \text{Tr} \left[\hat{\mathbf{r}}^T \mathbf{H}_S \hat{\mathbf{r}} \hat{\rho}_G^{\text{act}} \right] \\
&= \text{Tr} \left[\sum_{i,k} \hat{\mathbf{r}}_i (\mathbf{H}_S)_{ik} \hat{\mathbf{r}}_k \hat{\rho}_G^{\text{act}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\left(\sum_{i,k} \hat{\mathbf{r}}_i (\mathbf{H}_S)_{ik} \hat{\mathbf{r}}_k + \sum_{i,k} \hat{\mathbf{r}}_k (\mathbf{H}_S)_{ik} \hat{\mathbf{r}}_i \right) \hat{\rho}_G^{\text{act}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i,k} (\mathbf{H}_S)_{ik} \text{Tr} \left[(\hat{\mathbf{r}}_i \hat{\mathbf{r}}_k + \hat{\mathbf{r}}_k \hat{\mathbf{r}}_i) \hat{\rho}_G^{\text{act}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i,k} (\mathbf{H}_S)_{ik} (\sigma_S^{\text{act}})_{ki} \\
&= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_S \sigma_S^{\text{act}} \right].
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Según la igualdad (2.4), solo basta conocer σ_S^{act} y \mathbf{H}_S de un sistema VC con N pares de operadores canónicos para determinar \mathcal{W}_G , pues, retomando la expresión (2.3), la ergotropía Gaussiana extraída desde un estado Gaussiano también se puede expresar como [12]

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_G &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_S \sigma_S^{\text{act}} \right] - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{S}_{\hat{U}_G} \mathbf{S}_{\sigma_S^{\text{act}}}^{\uparrow} \sigma^{\uparrow} (\mathbf{S}_{\sigma_S^{\text{act}}}^{\uparrow})^T \mathbf{S}_{\hat{U}_G}^T \mathbf{S}_{\mathbf{H}_S}^{\downarrow} \mathbf{h}^{\downarrow} (\mathbf{S}_{\mathbf{H}_S}^{\downarrow})^T \right] \\
&= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_S \sigma_S^{\text{act}} \right] - \sum_{k=1}^N \sigma_k^{\uparrow} h_k^{\downarrow},
\end{aligned} \tag{2.5}$$

donde $\mathbf{S}_{\sigma_S^{\text{act}}}^{\uparrow}$ es la matriz simpléctica que transforma a la forma normal de Williamson σ^{\uparrow} en σ_S^{act} , $\mathbf{S}_{\mathbf{H}_S}^{\downarrow}$ es la matriz que transforma a la forma normal de Williamson \mathbf{h}^{\downarrow} en \mathbf{H}_S y

$$\mathbf{S}_{\hat{U}_G} = -\boldsymbol{\Omega}_N \mathbf{S}_{\mathbf{H}_S}^{\downarrow} (\mathbf{S}_{\sigma_S^{\text{act}}}^{\uparrow})^T \boldsymbol{\Omega}_N \left[\text{con } \boldsymbol{\Omega}_N = \bigoplus_{l=1}^N \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \right] \tag{2.6}$$

es la matriz simpléctica que se corresponde con el operador \hat{U}_G . En σ^{\uparrow} están contenidos en orden creciente los autovalores simplécticos, $\sigma_1^{\uparrow} \leq \dots \leq \sigma_N^{\uparrow}$, de σ_S^{act} y en \mathbf{h}^{\downarrow} están contenidos en orden decreciente los autovalores simplécticos, $h_1^{\downarrow} \geq \dots \geq h_N^{\downarrow}$, de \mathbf{H}_S . Un cálculo detallado con el que se obtiene la expresión de la ergotropía Gaussiana dada en (2.5) y la forma explícita para $\mathbf{S}_{\hat{U}_G}$ (2.6) se pueden encontrar en Hovhannisyan et al. [12].

*La igualdad (2.4) es general para cualquier tipo de estados (con primeros momentos nulos) de un sistema VC, no solo Gaussianos.

2.2. Baterías cuánticas disipativas

Una clase particular de baterías cuánticas son las baterías cuánticas disipativas [11, 12, 14]: un *sistema cuántico abierto* [55] que hace de batería es acoplado a un baño (o reservorio) que se ocupa como fuente de trabajo o carga. El baño corresponde a un sistema cuyo número de grados de libertad es mucho mayor que el número de grados de libertad de la batería y es capaz de influenciar las propiedades termodinámicas y dinámicas de la batería, pero no viceversa. La interacción en el tiempo entre la batería y el baño describe un proceso disipativo y de equilibración (*proceso de carga*). Al final del proceso, el sistema compuesto (batería más baño); cuyo Hamiltoniano es \hat{H}_{tot} , alcanza un estado $\hat{\Omega}_{\infty}$. En el límite termodinámico es posible asumir que el estado reducido (estacionario) de la batería será $\hat{\omega}_{\text{FM}} \equiv \text{Tr}_{\text{B}}[\exp(-\beta\hat{H}_{\text{tot}})/Z_{\text{tot}}] \approx \text{Tr}_{\text{B}}[\hat{\Omega}_{\infty}]$; donde $Z_{\text{tot}} \equiv \text{Tr}[\exp(-\beta\hat{H}_{\text{tot}})]$, β es el inverso de la temperatura del baño al inicio del proceso y donde Tr_{B} es la traza parcial sobre los grados de libertad del baño. Al estado $\hat{\omega}_{\text{FM}}$ se le conoce como *estado Gibbsiano de fuerza media* [7, 56]. Si el acoplamiento entre la batería y el baño se encuentra en el régimen de acoplamiento fuerte, $\hat{\omega}_{\text{FM}}$ podría corresponder a un estado activo del cual es posible extraer trabajo. En el caso particular en que la batería interactuara débilmente –*límite de acoplamiento débil* [55, 57]– con un baño térmico, como resultado del proceso de equilibración se obtendrá que el estado $\hat{\omega}_{\text{FM}}$ de la batería se reducirá a un estado térmico y pasivo $\propto \exp(-\beta\hat{H}_{\text{S}})$ con \hat{H}_{S} el Hamiltoniano libre de la batería y del cual no es posible extraer trabajo. Un baño térmico se distingue de cualquier otro medio ambiente o reservorio por la universalidad de sus relaciones de fluctuación-disipación, condiciones de balance detallado y relaciones de Kubo-Martin-Schwinger [58, 59].

2.2.1. Ciclo de carga y descarga

El proceso de carga y descarga de una batería cuántica disipativa obedece a un proceso cíclico. Para esquematizarlo, primero se define el Hamiltoniano del sistema compuesto batería más baño,

$$\hat{H}_{\text{tot}}(t) = \hat{H}_{\text{S}} + \hat{H}_{\text{B}} + \lambda(t)\hat{H}_{\text{I}}, \quad (2.7)$$

donde \hat{H}_{S} es el Hamiltoniano de la batería, \hat{H}_{B} es el Hamiltoniano del baño y \hat{H}_{I} es el Hamiltoniano de interacción que caracteriza el acoplamiento entre la batería y el baño. $\lambda(t)$ es una función adimensional que depende del tiempo y que funciona como parámetro de control para modular la interacción entre la batería y el baño durante el ciclo.

Inicialmente ($t = 0$) el sistema compuesto se encuentra en el estado térmico pasivo $\hat{\rho}_{\text{tot}}(0) = \hat{\tau}_{\text{tot}} \equiv \exp(-\beta\hat{H}_{\text{tot}}(0))/\text{Tr}[\exp(-\beta\hat{H}_{\text{tot}}(0))]$ con Hamiltoniano $\hat{H}_{\text{tot}}(0) = \hat{H}_{\text{S}} + \hat{H}_{\text{B}} + \hat{H}_{\text{I}}$ ($\lambda(0) = 1$), y donde se cumple que el estado reducido $\hat{\omega}_{\text{FM}} = \text{Tr}_{\text{B}}\hat{\tau}_{\text{tot}}$ corresponde al estado cargado de la batería. La batería y el baño se comienzan a desacoplar mediante un protocolo unitario de desconexión,

$$\hat{U}_{\text{d}}(t) = \hat{\mathcal{T}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left(\hat{H}_{\text{S}} + \hat{H}_{\text{B}} + \lambda(t')\hat{H}_{\text{I}} \right) \right], \quad (2.8)$$

de duración t_d y tal que $\lambda(t_d) = 0$. Al término del protocolo, el estado del sistema compuesto es $\hat{\rho}_{\text{tot}}(t_d) \equiv \hat{\Omega}_{t_d} = \hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)$, con Hamiltoniano $\hat{H}_{\text{tot}}(t_d) = \hat{H}_S + \hat{H}_B$. A tiempo t_d el estado de la batería es $\hat{\rho}_S(t_d) = \text{Tr}_B \hat{\Omega}_{t_d}$, el cual puede o no tener carga (ergotropía) al final de la desconexión.

En el caso en que $\hat{\rho}_S(t_d)$ posee ergotropía, se comienza un protocolo unitario de extracción/descarga,

$$\hat{U}_{\text{erg}}(t) = \hat{U}_{\mathcal{W}}(t) \otimes \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t\right), \quad (2.9)$$

donde $\hat{U}_{\mathcal{W}}(t)$ actúa solo sobre el espacio de Hilbert de la batería y el baño evoluciona libremente conforme al tiempo, $t_{\mathcal{W}}$, que pudiese durar la extracción. Luego, si se considera una extracción instantánea, $t_{\mathcal{W}} = 0$, que es el caso de esta tesis, (2.9) se reduce a

$$\hat{U}_{\text{erg}} = \hat{U}_{\mathcal{W}} \otimes \hat{\mathbb{I}}_B, \quad (2.10)$$

y $\hat{U}_{\mathcal{W}}$ extrae la ergotropía desde el estado de la batería, $\hat{\rho}_S(t_d)$, dejándola en el estado pasivo

$$\hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) = \text{Tr}_B \left[\hat{U}_{\text{erg}} \hat{\Omega}_{t_d} \hat{U}_{\text{erg}}^\dagger \right]. \quad (2.11)$$

A continuación, en un proceso sin costo energético, se descarta el baño y se reemplaza por un nuevo baño cuyo estado es $\hat{\tau}_B \equiv \exp(-\beta\hat{H}_B)/\text{Tr}_B[\exp(-\beta\hat{H}_B)]$, por lo que el estado del sistema compuesto queda $\hat{\rho}_{\text{tot}}(t_d) = \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B$, con Hamiltoniano $\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_S + \hat{H}_B$. El ciclo continua con el encendido de la interacción mediante un protocolo unitario de conexión,

$$\hat{U}_c(t) = \hat{\mathcal{T}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_d}^t dt' \left(\hat{H}_S + \hat{H}_B + \lambda(t')\hat{H}_I \right) \right], \quad (2.12)$$

de duración t_c , con $\lambda(t_d + t_c) = 1$ y $\hat{\rho}_{\text{tot}}(t_d + t_c) \equiv \hat{\Omega}_{t_c} = \hat{U}_c(t_d + t_c)\hat{\rho}_S^{\text{p}} \otimes \hat{\tau}_B \hat{U}_c^\dagger(t_d + t_c)$, para luego dar inicio al proceso de equilibrio/carga entre la batería y el baño por medio de la evolución

$$\hat{U}_{\text{eq}}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_I \right) t \right], \quad (2.13)$$

donde finalmente en un tiempo de equilibración t_{eq} el sistema total alcanza el estado $\hat{\Omega}_\infty = \hat{U}_{\text{eq}}(t_{\text{eq}})\hat{\Omega}_{t_c}\hat{U}_{\text{eq}}^\dagger(t_{\text{eq}})$, cerrándose así el ciclo para la batería con $\hat{\omega}_{\text{FM}} = \text{Tr}_B \hat{\Omega}_\infty = \text{Tr}_B \hat{\tau}_{\text{tot}}$. Durante el proceso de equilibrio $\lambda(t) = 1$, con $t \in [t_d + t_c, t_d + t_c + t_{\text{eq}}]$. Para el proceso de equilibrio se asume que en la evolución conjunta $[\hat{U}_{\text{eq}}(t)]$ la batería y el baño equilibran (a.k.a. termalizan) en el sentido que el estado de un subsistema \mathfrak{G} del sistema compuesto (batería + baño), cuyo soporte está contenido en $S \cup \text{soporte}(H_I)$, será

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{\mathfrak{G}}^\infty &\equiv \text{Tr}_{\text{tot} \setminus \mathfrak{G}} \hat{\Omega}_\infty \\ &= \text{Tr}_{\text{tot} \setminus \mathfrak{G}} \hat{\tau}_{\text{tot}} \end{aligned} \quad (2.14)$$

en el límite de tiempos t_{eq} 's tardíos [12, 60]. Se ha demostrado que la hipótesis de equilibración en el sentido de la ecuación (2.14) se cumple para estados iniciales descorrelacionados donde el baño puede iniciar en su estado canónico o microcanónico. Más aún, la hipótesis no se ve alterada si el estado inicial del sistema total en el proceso de carga posee correlaciones, pues

las correlaciones entre la batería y el baño surgidas producto de la evolución de conexión de duración finita, $\hat{U}_c(t)$, tendrán un alcance finito, pues estas se propagan a una velocidad finita acotada por el límite de Lieb-Robinson [61, 62], entonces, inicialmente siempre habrá un subsistema del sistema total que estará descorrelacionado del resto [12].

Vale la pena aclarar que tanto el proceso de desconexión, como la renovación del baño y el proceso de conexión, no es necesario que ocurran inmediatamente al terminar los procesos que los anteceden, por consiguiente, es posible agregar un tiempo de “espera” entre la ejecución de los procesos.

2.2.2. Trabajo: sistema cerrado

En sistemas donde $[\hat{H}_S + \hat{H}_B, \lambda(t)\hat{H}_I] \neq 0$ para algún t , tanto el protocolo de desconexión como el protocolo de conexión del ciclo conllevan un costo energético en forma de trabajo para activar o desactivar el acoplamiento (\hat{H}_I) entre la batería y el baño.

Un sistema compuesto con Hamiltoniano $\hat{H}_{\text{tot}}(t)$, donde un subsistema (la batería, por ejemplo) interactúa con un baño, constituye un sistema cerrado. El trabajo W hecho sobre el sistema compuesto en una evolución temporal de duración τ se define por [63]

$$W \equiv \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(\tau) \hat{\rho}_{\text{tot}}(\tau) \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \right]. \quad (2.15)$$

Según (2.15), el trabajo hecho en el protocolo de desconexión de duración $\tau = t_d$ y el trabajo hecho en el protocolo de conexión de duración $\tau = t_c$, W_d y W_c , respectivamente, aplicados sobre el sistema compuesto en el ciclo de carga/descarga de la batería, se escriben

$$\begin{aligned} W_d(t_d) &= \text{Tr} \left[\hat{H}_0 \left(\hat{\Omega}_{t_d} - \hat{\tau}_{\text{tot}} \right) \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_I \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\ &\quad \text{y} \\ W_c(t_c, t_d) &= \text{Tr} \left[\hat{H}_0 \left(\hat{\Omega}_{t_c} - \hat{\rho}_S^p(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \right) \right] + \text{Tr} \left[\hat{H}_I \hat{\Omega}_{t_c} \right], \end{aligned} \quad (2.16)$$

con $\hat{H}_0 \equiv \hat{H}_S + \hat{H}_B$.

2.2.3. Trabajo disipado y eficiencia

La ergotropía (2.1) extraída desde la batería por medio de \hat{U}_{erg} se expresa por

$$\mathcal{W}(t_d) = \text{Tr}_S \left[\hat{\rho}_S(t_d) \hat{H}_S \right] - \text{Tr}_S \left[\hat{\rho}_S^p(t_d) \hat{H}_S \right]. \quad (2.17)$$

Esta es una cantidad de trabajo extraído desde la batería, mientras que W_d y W_c son trabajos aplicados sobre el sistema compuesto. Luego, se define el *trabajo disipado* en el ciclo por [12]

$$W_{\text{dis}}(t_d, t_c) \equiv W_d(t_d) + W_c(t_c, t_d) - \mathcal{W}(t_d), \quad (2.18)$$

el cual da cuenta de la energía disipada en el ciclo y que no es posible de ser aprovechada o almacenada. Recordar que los procesos de desconexión (2.8), de conexión (2.12) y de carga

de la batería (2.13) son en general procesos disipativos con cierta duración. En este tipo de ciclos: desconexión-extracción-conexión-carga, se puede demostrar que W_{dis} es una cantidad no negativa. En efecto, vemos que

$$\begin{aligned}
W_{\text{dis}}(t_d, t_c) &= \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(t_d + t_c) \hat{U}_c(t_c) \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \hat{U}_c^\dagger(t_c) \right] - \text{Tr} \left[(\hat{H}_S + \hat{H}_B) \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \right] \\
&+ \text{Tr} \left[(\hat{H}_S + \hat{H}_B) \hat{U}_d(t_d) \hat{\tau}_{\text{tot}} \hat{U}_d^\dagger(t_d) \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] + \text{Tr}_S \left[\hat{H}_S \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \right] \\
&- \text{Tr}_S \left[\hat{H}_S \text{Tr}_B [\hat{U}_d(t_d) \hat{\tau}_{\text{tot}} \hat{U}_d^\dagger(t_d)] \right] \\
&= \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{U}_c(t_c) \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \hat{U}_c^\dagger(t_c) \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] + \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \text{Tr}_S [\hat{U}_d(t_d) \hat{\tau}_{\text{tot}} \hat{U}_d^\dagger(t_d)] \right] \\
&+ \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \text{Tr}_S [\hat{\tau}_{\text{tot}}] \right] \\
&= \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{U}_c(t_c) \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \hat{U}_c^\dagger(t_c) \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] + \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \text{Tr}_S [\hat{U}_d(t_d) \hat{\tau}_{\text{tot}} \hat{U}_d^\dagger(t_d)] \right] \\
&+ \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \text{Tr}_S [\hat{\tau}_{\text{tot}}] \right] + \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{\tau}'_{\text{tot}} \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{\tau}'_{\text{tot}} \right],
\end{aligned} \tag{2.19}$$

donde en la segunda igualdad se consideró que $\hat{H}_{\text{tot}}(t_c + t_d) = \hat{H}_{\text{tot}}(0)$ y en la tercera igualdad se sumó y restó el término $\text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{tot}}(0) \hat{\tau}'_{\text{tot}} \right]$; el cual contiene al estado de referencia $\hat{\tau}'_{\text{tot}} \equiv \exp(-\beta' \hat{H}_{\text{tot}}(0)) / \text{Tr}[\exp(-\beta' \hat{H}_{\text{tot}}(0))]$ [con $\beta' \equiv (k_B T')^{-1}$], cuya entropía de von Neumann –definida por $S(\hat{\rho}) \equiv -k_B \text{Tr}[\hat{\rho} \ln \hat{\rho}]$ – satisface

$$S(\hat{\tau}'_{\text{tot}}) = S(\hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B) = S(\hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d)) + S(\hat{\tau}_B), \tag{2.20}$$

y en consecuencia, también satisface

$$S(\hat{\tau}'_{\text{tot}}) = S\left(\hat{U}_c(t_c) \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \hat{U}_c^\dagger(t_c)\right), \tag{2.21}$$

pues la entropía de von Neumann es invariante ante transformaciones unitarias [51, 52]. Luego, reemplazando la identidad $\hat{H}_{\text{tot}} = -\beta'^{-1} \ln \hat{\tau}'_{\text{tot}} - \beta'^{-1} \ln \left[\text{Tr}[\exp(-\beta' \hat{H}_{\text{tot}}(0))] \right]$ en el primer y último término de la última igualdad en (2.19), ocupando que $-S(\hat{\tau}'_{\text{tot}}) = -S\left(\hat{U}_c(t_c) \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \hat{U}_c^\dagger(t_c)\right)$ [ver (2.21)], reemplazando la identidad $\hat{H}_{\text{tot}} = -\beta^{-1} \ln \hat{\tau}_{\text{tot}} - \beta^{-1} \ln \left[\text{Tr}[\exp(-\beta \hat{H}_{\text{tot}}(0))] \right]$ en los términos restantes que contienen a $\hat{H}_{\text{tot}}(0)$ y reemplazando la identidad $\hat{H}_B = -\beta^{-1} \ln \hat{\tau}_B - \beta^{-1} \ln \left[\text{Tr}_B[\exp(-\beta \hat{H}_B)] \right]$ en los términos que contienen a \hat{H}_B , se obtiene que

$$\begin{aligned}
W_{\text{dis}}(t_d, t_c) &= T' D \left(\hat{U}_c(t_c) \hat{\rho}_S^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \hat{U}_c^\dagger(t_c) \middle| \hat{\tau}'_{\text{tot}} \right) - \beta^{-1} \text{Tr}[\hat{\tau}'_{\text{tot}} \ln \hat{\tau}_{\text{tot}}] + \beta^{-1} \text{Tr}[\hat{\tau}_{\text{tot}} \ln \hat{\tau}_{\text{tot}}] \\
&+ \beta^{-1} \text{Tr}_B[\hat{\tau}_B \ln \hat{\tau}_B] - \beta^{-1} \text{Tr}_B \left\{ \text{Tr}_S [\hat{U}_d(t_d) \hat{\tau}_{\text{tot}} \hat{U}_d^\dagger(t_d)] \ln \hat{\tau}_B \right\},
\end{aligned} \tag{2.22}$$

donde se introdujo la *entropía relativa* entre dos estados $\hat{\rho}$ y $\hat{\sigma}$: $D(\hat{\rho} \middle| \hat{\sigma}) \equiv k_B \text{Tr}[\hat{\rho} \ln \hat{\rho} - \hat{\rho} \ln \hat{\sigma}] \geq 0$ (que es **no negativa**) [64]. Ahora, sumando y restando los términos $\beta^{-1} \text{Tr}[\hat{\tau}'_{\text{tot}} \ln \hat{\tau}'_{\text{tot}}]$

y $\beta^{-1}\text{Tr}_B\{\text{Tr}_S[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)]\ln\text{Tr}_S[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)]\}$, y reuniendo términos convenientemente, la ecuación (2.22) queda

$$\begin{aligned} W_{\text{dis}}(t_d, t_c) &= T'D \left(\hat{U}_c(t_c)\hat{\rho}_S^p(t_d) \otimes \hat{\tau}_B\hat{U}_c^\dagger(t_c) \parallel \hat{\tau}'_{\text{tot}} \right) + TD \left(\text{Tr}_S[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)] \parallel \hat{\tau}_B \right) \\ &+ TD \left(\hat{\tau}'_{\text{tot}} \parallel \hat{\tau}_{\text{tot}} \right) - TS(\hat{\tau}_{\text{tot}}) + TS(\text{Tr}_S[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)]) - TS(\hat{\tau}_B) \\ &+ TS(\hat{\tau}'_{\text{tot}}). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Finalmente, dado que $S(\hat{\tau}_{\text{tot}}) = S(\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d))$, dada la igualdad (2.20) y considerando que $S(\hat{\rho}_S^p(t_d)) = S(\text{Tr}_B[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)])$; pues los estados $\hat{\rho}_S^p(t_d)$ y $\text{Tr}_B[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)]$ están conectados por la transformación unitaria que extrae la ergotropía, se concluye que

$$\begin{aligned} W_{\text{dis}}(t_d, t_c) &= T'D \left(\hat{U}_c(t_c)\hat{\rho}_S^p(t_d) \otimes \hat{\tau}_B\hat{U}_c^\dagger(t_c) \parallel \hat{\tau}'_{\text{tot}} \right) + TD \left(\text{Tr}_S[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)] \parallel \hat{\tau}_B \right) \\ &+ TD \left(\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d) \parallel \text{Tr}_B[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)] \otimes \text{Tr}_S[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)] \right) \\ &+ TD \left(\hat{\tau}'_{\text{tot}} \parallel \hat{\tau}_{\text{tot}} \right) \\ &\geq 0, \end{aligned} \quad (2.24)$$

donde cada uno de los sumandos son cantidades no negativas. La desigualdad (2.24) es una manifestación de la segunda ley de la termodinámica en la forma de Kelvin-Planck: *no existe un proceso cuyo único efecto sea transformar en trabajo el calor que sale de un único reservorio o baño térmico* [65, 46]. Ahora bien, escribiendo $W_{\text{dis}}(t_d, t_c) \equiv T\Sigma(t_d, t_c)$, se interpreta a

$$\Sigma(t_d, t_c) \geq 0 \quad (2.25)$$

como la producción de entropía del ciclo [12], la cual, debido a que por construcción la ergotropía es una cantidad no negativa, satisface la desigualdad

$$T\Sigma(t_d, t_c) \leq W_d(t_d) + W_c(t_c, t_d). \quad (2.26)$$

Por motivos que se verán en el Capítulo 4, es pertinente indicar que la desigualdad (2.24) sigue siendo válida si $\hat{U}_c(t_c = 0) = \hat{\mathbb{I}}$ o si $\hat{U}_c(t_c = 0) = \hat{\mathbb{I}}$ y $\hat{U}_d(t_d = 0) = \hat{\mathbb{I}}$ a la vez. La desigualdad (2.24) para el caso particular $\hat{U}_c(t_c = 0) = \hat{\mathbb{I}}$ y $\hat{U}_d(t_d = 0) = \hat{\mathbb{I}}$ ha sido demostrada en Hovhannisyan et al. [12]. Relacionado al costo energético de implementar el ciclo se define la *eficiencia* [11, 12, 14],

$$\eta(t_d, t_c) \equiv \frac{\mathcal{W}(t_d)}{W_d(t_d) + W_c(t_c, t_d)}, \quad (2.27)$$

la cual cuantifica la cantidad de energía invertida en el ciclo versus la cantidad de energía obtenida del ciclo, dicho de otra manera, es una figura de mérito que cuantifica el desempeño del ciclo. Como consecuencia de la segunda ley [ver desigualdad (2.26)], la eficiencia del ciclo está acotada por 1, pues

$$\begin{aligned} \eta(t_d, t_c) &= 1 - \frac{T\Sigma(t_d, t_c)}{W_d(t_d) + W_c(t_c, t_d)} \\ &\leq 1. \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.2.4. Energética del ciclo cuando $\hat{\tau}_{\text{tot}}$ es un estado Gaussiano con primeros momentos nulos

Debido a que el estado $\hat{\tau}_{\text{tot}}$ es un estado Gaussiano con primeros momentos nulos y el Hamiltoniano total, $\hat{H}_{\text{tot}}(0)$, es cuadrático y acotado inferiormente, los trabajos de desconexión y conexión (2.16) se pueden calcular como

$$W_d = \frac{1}{2} \text{Tr} [\mathbf{H}_0 (\sigma_{t_d} - \sigma_{\text{tot}})] - \frac{1}{2} \text{Tr} [\mathbf{H}_I \sigma_{\text{tot}}]$$

y

$$W_c = \frac{1}{2} \text{Tr} [\mathbf{H}_0 (\sigma_{t_c} - \sigma_S^p \oplus \sigma_B)] + \frac{1}{2} \text{Tr} [\mathbf{H}_I \sigma_{t_c}],$$
(2.29)

donde \mathbf{H}_0 es la matriz Hamiltoniana de \hat{H}_0 , \mathbf{H}_I es la matriz Hamiltoniana de \hat{H}_I y σ_{tot} , σ_{t_d} , σ_{t_c} y $\sigma_S^p \oplus \sigma_B$ son las respectivas MC's asociadas a los estados $\hat{\tau}_{\text{tot}}$, $\hat{\Omega}_{t_d}$, $\hat{\Omega}_{t_c}$ y $\hat{\rho}_S^p \otimes \hat{\tau}_B$. Como se mencionó en la sección anterior, la ventaja práctica de las expresiones para W_c y W_d en (2.29) versus las de (2.16), es que en el primer caso son trazas de matrices de dimensión finita mientras que en el segundo caso son trazas de operadores de dimensión infinita. En este mismo contexto, como la traza parcial de un estado Gaussiano es un estado Gaussiano, la ergotropía (2.17) corresponde a la ergotropía Gaussiana (2.5) y se puede expresar por

$$W_G = \frac{1}{2} \text{Tr} [\sigma_S(t_d) \mathbf{H}_S] - \frac{1}{2} [\sigma_S^p(t_d) \mathbf{H}_S],$$
(2.30)

donde \mathbf{H}_S es la matriz Hamiltoniana de \hat{H}_S , $\sigma_S(t_d)$ es la MC de $\hat{\rho}_S(t_d)$ y $\sigma_S^p(t_d)$ es la MC de $\hat{\rho}_S^p(t_d)$. En (2.30) las trazas aplicadas también son sobre matrices de dimensión finita.

Por último, mencionar que en un ciclo termodinámico se debe cumplir que tanto el cambio en la energía interna, \mathbf{E}_S , como el cambio en la entropía de von Neumann, S_S , de un sistema de interés S , deben ser nulos ($\Delta \mathbf{E}_S = 0$ y $\Delta S_S = 0$) ya que \mathbf{E}_S y S_S son funciones de estado. Si el estado de un sistema con N pares de operadores canónicos es Gaussiano, es de ayuda expresar su entropía de von Neumann por

$$S(\hat{\rho}) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\nu_j + 1}{2} \right) \ln \left(\frac{\nu_j + 1}{2} \right) - \left(\frac{\nu_j - 1}{2} \right) \ln \left(\frac{\nu_j - 1}{2} \right),$$
(2.31)

pues solo será necesario conocer la MC del estado Gaussiano para poder calcular su entropía debido a que el set $\{\nu_j\}_{j=1}^N$ son los autovalores simplécticos de la MC [23, 66].

2.3. Aspectos relevantes del capítulo

A modo de resumen, vale la pena destacar los siguientes aspectos del presente capítulo que serán de utilidad en los capítulos siguientes:

- Una batería cuántica es un sistema que almacena trabajo que puede ser posteriormente usado.

- La cantidad máxima de trabajo útil que puede ser extraído desde una batería por medio de una transformación unitaria se denomina ergotropía.
- Cuando la transformación unitaria que extrae la ergotropía es una transformación Gaussiana, a la ergotropía la denominamos ergotropía Gaussiana.
- La energía de un sistema con Hamiltoniano puramente cuadrático y estado Gaussiano con primeros momentos nulos se puede expresar en términos de la matriz Hamiltoniana y la matriz de covarianza.
- Existe una clase particular de baterías cuánticas que se carga a través de la interacción fuerte con un baño. La batería se modela como un sistema cuántico abierto y las denominamos baterías cuánticas disipativas.
- El ciclo termodinámico de carga y descarga de la batería se basa en 4 ramas: proceso de desconexión, proceso de descarga, proceso de conexión y proceso de carga.
- Al estado cargado de la batería lo denominamos estado Gibbsiano de fuerza media. Este estado será definido y detallado en el siguiente capítulo para un modelo en particular.
- El ciclo supone la hipótesis de equilibración al final del proceso de carga.
- Para este ciclo, demostramos, se cumple la segunda ley de la termodinámica en la forma de Kelvin-Planck.
- La eficiencia del ciclo, definida como la razón entre la cantidad de energía extraída de la batería y el costo en trabajo necesario para implementar el ciclo, es una cantidad acotada por 1.

Capítulo 3

Modelo de Caldeira-Leggett (CL)

El propósito de este capítulo es presentar el modelo usado para implementar luego un proceso cíclico de carga y descarga de una batería cuántica que será modelada como un oscilador armónico cuántico amortiguado (Capítulo 4). Resolveremos la ecuación estocástica de Langevin que describe la dinámica Gaussiana en el cuadro de Heisenberg de un oscilador que interactúa con un baño de osciladores en el límite termodinámico y pondremos especial atención en el estado estacionario del oscilador producto de la dinámica, el cual, veremos, será el estado cargado de la batería. Encontraremos expresiones explícitas que caracterizan al estado estacionario y haremos uso de las herramientas de la teoría de respuesta lineal y el formalismo simpléctico para demostrar que el estado estacionario es igual al estado Gibbsiano de fuerza media en este modelo. Al finalizar, describiremos la evolución simpléctica del sistema compuesto (oscilador+baño finito) –análoga a la dinámica descrita por la ecuación de Langevin– y usaremos las herramientas descritas en el Capítulo 1 para implementarla computacionalmente. Compararemos los resultados obtenidos por medio de la evolución de Langevin con los resultados numéricos de la evolución simpléctica y corroboraremos numéricamente que el estado estacionario del oscilador es igual al estado de fuerza media.

3.1. Hamiltoniano

La dinámica de un sistema mecánico amortiguado o disipativo con coordenada Q_0 y momentum P_0 acoplado a un baño; el cual introduce un proceso estocástico (ruido) en el sistema, se puede describir de manera general por medio del siguiente Hamiltoniano clásico del sistema compuesto [67]:

$$H_{\text{dis}} = H_S + H_B + H_I, \quad (3.1)$$

donde, en primer lugar, H_S es el Hamiltoniano del sistema de interés, el cual corresponde a una partícula de masa m_0 moviéndose en un potencial $V(Q_0)$, es decir,

$$H_S = \frac{P_0^2}{2m_0} + V(Q_0). \quad (3.2)$$

En segundo lugar, H_B es el Hamiltoniano del baño, el cual consiste en un set de N osciladores armónicos libres de masas $\{m_k\}_{k \geq 1}$ y frecuencias $\{\omega_k\}_{k \geq 1}$, es decir,

$$H_B = \sum_{k=1}^N \left(\frac{P_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2 Q_k^2}{2} \right). \quad (3.3)$$

Por último, H_I es el Hamiltoniano de interacción entre el sistema y el baño, el cual se asume ser lineal en las coordenadas del baño,

$$H_I = - \sum_{k=1}^N F_k(Q_0) Q_k, \quad (3.4)$$

donde $F_k(Q_0)$ es una función de Q_0 que caracteriza en términos generales el acoplamiento individual entre el sistema y la coordenada Q_k del k -ésimo oscilador del baño. Si uno extrema el potencial global de H_{dis} con respecto a la coordenada Q_j ($j \in \{1, \dots, N\}$) y Q_0 fijo, se obtiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_{\text{dis}}}{\partial Q_j} &= m_j \omega_j^2 Q_j - F_j(Q_0) \\ &\stackrel{!}{=} 0 \\ \implies Q_j^{\text{mín}} &= \frac{F_j(Q_0)}{m_j \omega_j^2}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

el cual corresponde al mínimo del potencial global en la dirección Q_j que depende solo de Q_0 y de los parámetros del baño. Luego, si uno reemplaza Q_j por $Q_j^{\text{mín}}$ en H_{dis} , se observa que el sistema queda bajo los efectos de un potencial (efectivo) renormalizado [68, 67, 55]

$$V_{\text{ef}} \equiv V(Q_0) - \sum_{k=1}^N \frac{F_k^2(Q_0)}{2m_k \omega_k^2}. \quad (3.6)$$

Con el fin de anular el desplazamiento al que se ve sometido $V(Q_0)$ producto de la interacción lineal con el baño (3.6) y fijar que el efecto del baño sobre el sistema sea solo de naturaleza disipativa, se agrega en H_{dis} el *contra-término*

$$\Delta V(Q_0) \equiv \sum_{k=1}^N \frac{F_k^2(Q_0)}{2m_k \omega_k^2}. \quad (3.7)$$

Considerando (3.7), H_{dis} en su versión cuantizada queda expresado por

$$\hat{H}_{\text{dis}} = \frac{\hat{P}_0^2}{2m_0} + \hat{V}(\hat{Q}_0) + \sum_{k=1}^N \frac{F_k^2(\hat{Q}_0)}{2m_k \omega_k^2} + \sum_{k=1}^N \left(\frac{\hat{P}_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2 \hat{Q}_k^2}{2} \right) - \sum_{k=1}^N F_k(\hat{Q}_0) \hat{Q}_k, \quad (3.8)$$

el cual depende de los pares de operadores canónicos $\{\hat{Q}_l, \hat{P}_l\}_{l=0}^N$. La elección de una interacción lineal con las coordenadas del baño se justifica en que el acoplamiento entre el sistema con cada uno de los grados de libertad \hat{Q}_k es inversamente proporcional al volumen del baño,

luego, en la medida que se consideren más osciladores ($N \gg 1$), los acoplamientos individuales entre F_k y \hat{Q}_k se pueden considerar débiles, no obstante, la interacción total entre el sistema y el baño no necesariamente lo es, pues, cada vez que el baño es más grande, el acoplamiento neto y los efectos disipativos inducidos por el baño también lo son [67].

En el caso particular en que se escoge un potencial armónico para el sistema,

$$\hat{V}(\hat{Q}_0) = \frac{m_0\omega_0^2}{2}\hat{Q}_0^2, \quad (3.9)$$

y también se escoge una interacción separable que modela una disipación estrictamente lineal,

$$F_k(\hat{Q}_0) \equiv g_k\hat{Q}_0; \quad (3.10)$$

con las constantes $\{g_k\}_{k \geq 1}$ las amplitudes de los acoplamientos entre el sistema y los osciladores del baño, entonces el operador \hat{H}_{dis} (3.4) queda escrito como

$$\hat{H}_{\text{dis}} = \frac{\hat{P}_0^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega_0^2}{2}\hat{Q}_0^2 + \frac{m_0\omega_R^2}{2}\hat{Q}_0^2 + \sum_{k=1}^N \left(\frac{\hat{P}_k^2}{2m_k} + \frac{m_k\omega_k^2}{2}\hat{Q}_k^2 \right) - \hat{Q}_0 \sum_{k=1}^N g_k\hat{Q}_k, \quad (3.11)$$

donde ω_R se conoce como la *frecuencia de renormalización** y se define por

$$\omega_R^2 \equiv \sum_{k=1}^N \frac{g_k^2}{m_0 m_k \omega_k^2}, \quad (3.12)$$

la cual surge debido a la introducción del contra-término para el caso (3.10) y explícitamente representa un desplazamiento en la frecuencia libre del sistema (ω_0). El modelo descrito por el Hamiltoniano (3.11), que desde ahora en adelante denominaremos \hat{H}_{CL} , es conocido como el modelo de Caldeira-Leggett [68], donde el sistema corresponde a un oscilador armónico cuántico (a.k.a. oscilador central). \hat{H}_{CL} es un Hamiltoniano puramente cuadrático acotado inferiormente, por lo que posee una matriz Hamiltoniana $\mathbf{H}_{\text{CL}} > 0$ y puede escribirse como

$$\hat{H}_{\text{CL}} = \hat{\mathbf{r}}_{\text{CL}}^T \mathbf{H}_{\text{CL}} \hat{\mathbf{r}}_{\text{CL}}, \quad (3.13)$$

con $\hat{\mathbf{r}}_{\text{CL}}$ el vector que agrupa los operadores canónicos del sistema y el baño.

3.2. Ecuación de Langevin

Las evoluciones temporales de los operadores canónicos que forman parte del Hamiltoniano \hat{H}_{CL} obedecen el set de ecuaciones de Heisenberg

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}_{\text{CL}}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathbf{r}}_{\text{CL}}(t), \hat{H}_{\text{CL}} \right]. \quad (3.14)$$

*La incorporación de la frecuencia ω_R en (3.11) asegura que el estado estacionario del sistema sea el estado térmico, $\propto \exp(-\beta\hat{H}_S)$, cuando el acoplamiento con un baño térmico (con inverso de la temperatura β) está en el régimen de acoplamiento débil [69, 70].

En particular, la ecuación de evolución del operador posición del oscilador central es

$$\frac{d\hat{Q}_0(t)}{dt} = \frac{\hat{P}_0(t)}{m_0} \quad (3.15)$$

y la del operador momentum es

$$\frac{d\hat{P}_0(t)}{dt} = \sum_{k=1}^N g_k \hat{Q}_k(t) - m_0(\omega_0^2 + \omega_R^2) \hat{Q}_0(t). \quad (3.16)$$

Derivando (3.15) con respecto a t y ocupando (3.16), se obtiene para el operador \hat{Q}_0 la ecuación diferencial de segundo orden

$$\frac{d^2\hat{Q}_0(t)}{dt^2} + (\omega_0^2 + \omega_R^2) \hat{Q}_0(t) = \frac{1}{m_0} \sum_{k=1}^N g_k \hat{Q}_k(t), \quad (3.17)$$

que depende de la evolución de cada operador \hat{Q}_k de los osciladores del baño. De manera análoga a obtención de (3.17) y haciendo uso de la ecuación de evolución de cada operador \hat{P}_k , se obtiene una ecuación de segundo orden para cada operador \hat{Q}_k expresada por

$$\frac{d^2\hat{Q}_k(t)}{dt^2} + \omega_k^2 \hat{Q}_k(t) = \frac{g_k}{m_k} \hat{Q}_0(t) \quad (3.18)$$

y cuya solución –obtenida por medio del método de la transformada de Fourier[†]– es

$$\begin{aligned} \hat{Q}_k(t) = \hat{Q}_k(0) \cos(\omega_k t) + \frac{\hat{P}_k(0)}{m_k \omega_k} \sin(\omega_k t) + \frac{g_k}{m_k \omega_k^2} \left[\hat{Q}_0(t) - \cos(\omega_k t) \hat{Q}_0(0) \right] \\ - \frac{g_k}{m_k \omega_k^2} \int_0^t dt' \cos[\omega_k(t-t')] \frac{d\hat{Q}_0(t')}{dt'}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde se fijó por simplicidad un tiempo inicial $t_0 = 0$ (pues su elección es arbitraria) y donde $\hat{Q}_k(0)$ y $\hat{P}_k(0)$ son los respectivos operadores iniciales posición y momentum del k -ésimo oscilador del baño. Reemplazando (3.19) en (3.17), la ecuación de evolución queda

$$\begin{aligned} \frac{d^2\hat{Q}_0(t)}{dt^2} + \omega_0^2 \hat{Q}_0(t) + \int_0^t dt' \left[\frac{1}{m_0} \sum_{k=1}^N \frac{g_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos[\omega_k(t-t')] \right] \frac{d\hat{Q}_0(t')}{dt'} \\ = \frac{1}{m_0} \sum_{k=1}^N g_k \left[\hat{Q}_k(0) \cos(\omega_k t) + \frac{\hat{P}_k(0)}{m_k \omega_k} \sin(\omega_k t) \right] - \frac{1}{m_0} \sum_{k=1}^N \frac{g_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) \hat{Q}_0(0), \end{aligned} \quad (3.20)$$

la cual es una ecuación integro-diferencial cerrada para el operador \hat{Q}_0 . Definiendo la función

$$\gamma(t) \equiv \Theta(t) \frac{1}{m_0} \sum_{k=1}^N \frac{g_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t); \quad \text{con } \Theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } t > 0 \\ 0 & \text{si } t < 0 \end{cases}, \quad (3.21)$$

[†]La transformada de Fourier de una función u operador, $\mathcal{F}(t)$, está definida por $\tilde{\mathcal{F}}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{F}(t) \exp(i\omega t)$. Luego, $\mathcal{F}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{\mathcal{F}}(\omega) \exp(-i\omega t)$.

y el operador

$$\hat{\xi}(t) \equiv \sum_{k=1}^N g_k \left[\hat{Q}_k(0) \cos(\omega_k t) + \frac{\hat{P}_k(0)}{m_k \omega_k} \sin(\omega_k t) \right], \quad (3.22)$$

la ecuación (3.20) adquiere la forma

$$\frac{d^2 \hat{Q}_0(t)}{dt^2} + \int_0^t dt' \gamma(t-t') \frac{d\hat{Q}_0(t')}{dt'} + \omega_0^2 \hat{Q}_0(t) = \frac{\hat{\xi}(t)}{m_0} - \gamma(t) \hat{Q}_0(0), \quad (3.23)$$

que es conocida como *la ecuación de Langevin cuántica* [69, 71, 72, 73] y determina de manera exacta la evolución temporal de $\hat{Q}_0(t)$ sujeta a la preparación inicial del baño.

Haciendo uso de los operadores escalera que actúan sobre los espacios de Hilbert de cada oscilador del baño [ver (1.3)], el operador $\hat{\xi}(t)$ (3.22) también se puede escribir como

$$\hat{\xi}(t) = \sum_{k=1}^N g_k \left(\frac{\hbar}{2m_k \omega_k} \right)^{1/2} \left[\hat{a}_k^\dagger(0) \exp(i\omega_k t) + \hat{a}_k(0) \exp(-i\omega_k t) \right]. \quad (3.24)$$

Cuando el estado del baño es un estado térmico,

$$\hat{\tau}_B = \frac{\exp(-\beta \hat{H}_B)}{\text{Tr}[\exp(-\beta \hat{H}_B)]}, \quad (3.25)$$

$\hat{\xi}(t)$ es un operador de ruido coloreado con estadística Gaussiana que induce fluctuaciones térmicas en el sistema [74, 73], pues se cumple que el promedio

$$\langle \hat{\xi}(t) \rangle_{\hat{\tau}_B} = 0 \quad \forall t, \quad (3.26)$$

la función de autocorrelación a distintos tiempos es

$$\langle \hat{\xi}(t) \hat{\xi}(t') \rangle_{\hat{\tau}_B} = \frac{\hbar}{2} \sum_{k=1}^N \frac{g_k^2}{m_k \omega_k} \left[\coth \left(\frac{\beta \hbar \omega_k}{2} \right) \cos[\omega_k(t-t')] - i \sin[\omega_k(t-t') \omega_k] \right] \quad (3.27)$$

y la función de autocorrelación simetrizada es

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle \{ \hat{\xi}(t), \hat{\xi}(t') \} \rangle_{\hat{\tau}_B} &= \frac{1}{2} \left[\langle \hat{\xi}(t) \hat{\xi}(t') \rangle_{\hat{\tau}_B} + \langle \hat{\xi}(t') \hat{\xi}(t) \rangle_{\hat{\tau}_B} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \sum_{k=0}^N \frac{g_k^2}{m_k \omega_k} \coth \left(\frac{\beta \hbar \omega_k}{2} \right) \cos[\omega_k(t-t')]. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Las expresiones (3.26) y (3.27) se obtienen considerando que

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_k^\dagger(0) \hat{a}_j(0) \rangle_{\hat{\tau}_B} &= \frac{\delta_{kj}}{\exp(\beta \hbar \omega_k) - 1}, \\ \langle \hat{a}_k(0) \hat{a}_j^\dagger(0) \rangle_{\hat{\tau}_B} &= \frac{\delta_{jk}}{\exp(\beta \hbar \omega_j) - 1} + \delta_{kj} \end{aligned} \quad (3.29)$$

y

$$\langle \hat{a}_k(0) \rangle_{\hat{\tau}_B} = \langle \hat{a}_k^\dagger(0) \rangle_{\hat{\tau}_B} = \langle \hat{a}_k(0) \hat{a}_j(0) \rangle_{\hat{\tau}_B} = \langle \hat{a}_k^\dagger(0) \hat{a}_j^\dagger(0) \rangle_{\hat{\tau}_B} = 0,$$

los cuales son valores promedios con respecto al estado $\hat{\tau}_B$ que se obtienen considerando la acción de los operadores $\{\hat{a}_k(0), \hat{a}_k^\dagger(0)\}_{k=1}^N$ sobre la base de número asociada a cada oscilador del baño [ver (1.4)]. La función $\gamma(t)$ corresponde a un kernel de memoria-disipación que distingue entre que el proceso estocástico sea Markoviano o no Markoviano [55], es decir, que existan efectos de memoria de información en la dinámica de interacción entre el oscilador central y el baño, y también es el causante del fenómeno disipativo o de amortiguamiento.

3.2.1. Solución ecuación de Langevin

Aplicando el método de la transformada de Laplace[‡] a la ecuación de Langevin (3.23), se obtiene que

$$\begin{aligned} \left[s^2 \mathcal{L}\{\hat{Q}_0\}(s) - s\hat{Q}_0(0) - \frac{d\hat{Q}_0(t)}{dt} \Big|_{t=0} \right] + \omega_0^2 \mathcal{L}\{\hat{Q}_0\}(s) + \mathcal{L}\{\gamma\}(s) \left[s\mathcal{L}\{\hat{Q}_0\}(0) - \hat{Q}_0(0) \right] \\ = \frac{1}{m_0} \mathcal{L}\{\hat{\xi}\}(s) - \mathcal{L}\{\gamma\}(s)\hat{Q}_0(0). \end{aligned}$$

Luego, reordenando términos, cancelando términos idénticos y ocupando que $m_0 d\hat{Q}_0(t)/dt = \hat{P}_0(t)$, se obtiene que la transformada de Laplace del operador \hat{Q}_0 es

$$\mathcal{L}\{\hat{Q}_0\}(s) = \mathcal{L}\{G\}(s)\hat{Q}_0(0) + \mathcal{L}\{F\}(s)\hat{P}_0(0) + \mathcal{L}\{F\}(s)\mathcal{L}\{\hat{\xi}\}(s), \quad (3.30)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{G\}(s) &= \frac{s}{s^2 + \omega_0^2 + s\mathcal{L}\{\gamma\}(s)} \\ &\text{y} \\ \mathcal{L}\{F\}(s) &= \frac{1}{m_0[s^2 + \omega_0^2 + s\mathcal{L}\{\gamma\}(s)]}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Finalmente, aplicando la transformada de Laplace inversa a la expresión (3.30), se concluye que la solución de la ecuación de Langevin (3.23) se expresa por [76]

$$\hat{Q}_0(t) = G(t)\hat{Q}_0(0) + F(t)\hat{P}_0(0) + \int_0^t dt' F(t-t')\hat{\xi}(t'), \quad (3.32)$$

y como para el operador momentum se cumple la ecuación de Heisenberg (3.16), entonces

$$\hat{P}_0(t) = G(t)\hat{P}_0(0) + m_0 \frac{dG(t)}{dt} \hat{Q}_0(0) + \int_0^t dt' G(t-t')\hat{\xi}(t'), \quad (3.33)$$

[‡]La transformada de Laplace de una función u operador, $\mathcal{F}(t)$, está definida por $\mathcal{L}\{\mathcal{F}\}(s) \equiv \int_0^\infty dt \mathcal{F}(t) \exp(-st)$. La transformada de Laplace inversa de una función, $\mathcal{F}(s)$, es la función $\mathcal{F}(t)$ (si tal función existe) que satisface $\mathcal{L}\{\mathcal{F}\}(s) = \mathcal{F}(s)$, entonces, si la inversa de $\mathcal{F}(s)$ existe, denotamos la transformada de Laplace inversa de $\mathcal{F}(s)$ como $\mathcal{F}(t) = \mathcal{L}^{-1}[\mathcal{F}(s)]$ [75].

donde

$$\begin{aligned} G(t) &= \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{s}{s^2 + \omega_0^2 + s\mathcal{L}\{\gamma\}(s)} \right] \\ F(t) &= \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{m_0[s^2 + \omega_0^2 + s\mathcal{L}\{\gamma\}(s)]} \right]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Tomando $t \rightarrow +\infty$, las soluciones (3.32) y (3.33) se reducen a

$$\begin{aligned} \hat{Q}_0(+\infty) &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_0^t dt' F(t-t') \hat{\xi}(t') \\ \hat{P}_0(+\infty) &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_0^t dt' G(t-t') \hat{\xi}(t'), \end{aligned} \quad (3.35)$$

pues

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow +\infty} G(t) &= \mathcal{L}^{-1} \left[\lim_{s \rightarrow 0} \frac{s}{s^2 + \omega_0^2 + s\mathcal{L}\{\gamma\}(s)} \right] = 0, \\ \lim_{t \rightarrow +\infty} F(t) &= \mathcal{L}^{-1} \left[\lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{m_0[s^2 + \omega_0^2 + s\mathcal{L}\{\gamma\}(s)]} \right] = 0, \end{aligned} \quad (3.36)$$

y

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{dG(t)}{dt} = \mathcal{L}^{-1} \left[\lim_{s \rightarrow 0} s\mathcal{L}\{G\}(s) - G(0) \right] = 0,$$

con $G(0) = \lim_{s \rightarrow +\infty} s\mathcal{L}\{G\}(s) = 1$ [76, 77].

Si se considera que el estado inicial del sistema compuesto es un estado producto (desrelacionado),

$$\hat{\rho}_{\text{tot}}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\tau}_B; \quad (3.37)$$

donde el estado inicial del baño es el estado térmico (3.25) y $\hat{\rho}_S(0)$ es el estado inicial (arbitrario) del oscilador central, haciendo uso de los valores promedio (3.26) y las soluciones (3.35) se determina que cuando $t \rightarrow +\infty$ los primeros momentos del oscilador central con respecto al estado $\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)$ son nulos,

$$\langle \hat{Q}_0(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} = \langle \hat{P}_0(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} = 0. \quad (3.38)$$

Además, cuando $t \rightarrow +\infty$, haciendo uso de la expresión (3.28) para la función de correlación

simetrizada y de las soluciones estacionarias (3.35) se obtiene que

$$\begin{aligned}
\langle \{\hat{Q}_0(+\infty), \hat{P}_0(+\infty)\} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} &= \langle \{\hat{P}_0(+\infty), \hat{Q}_0(+\infty)\} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}} \\
&= \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' F(t-t') G(t-t'') \langle \{\hat{\xi}(t'), \hat{\xi}(t'')\} \rangle_{\hat{\tau}_B} \\
&= \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' F(t') G(t'') \langle \{\hat{\xi}(t-t'), \hat{\xi}(t-t'')\} \rangle_{\hat{\tau}_B} \\
&= \int_0^\infty dt' \int_0^\infty dt'' F(t') G(t'') \langle \{\hat{\xi}(t'), \hat{\xi}(t'')\} \rangle_{\hat{\tau}_B} \\
&= \hbar \sum_{k=0}^N \frac{g_k^2}{m_k \omega_k} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega_k}{2}\right) \int_0^\infty dt' \int_0^\infty dt'' F(t') G(t'') \cos[\omega_k(t' - t'')] \\
&= \frac{\hbar}{2} \sum_{k=0}^N \frac{g_k^2}{m_k \omega_k} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega_k}{2}\right) [\mathcal{L}\{F\}(-i\omega_k) \mathcal{L}\{G\}(i\omega_k) \\
&\quad + \mathcal{L}\{F\}(i\omega_k) \mathcal{L}\{G\}(-i\omega_k)] \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{3.39}$$

por consiguiente, los elementos no diagonales de la MC del oscilador central son nulos.

3.2.2. Límite continuo

El baño y la intensidad del acoplamiento entre cada uno de sus osciladores y el oscilador central están caracterizados por la *densidad espectral* [68, 67],

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^N \frac{g_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k). \tag{3.40}$$

Si la cantidad de osciladores del baño son tales que las *recurrencias de Poincaré* ocurren en un tiempo prácticamente infinito [78, 79, 67], es apropiado tratar al baño en el límite termodinámico o límite continuo, es decir, que su comportamiento sea de baño térmico con inverso de la temperatura β y donde sus frecuencias, $\{\omega_k\}_{k=1}^N$, son densas y forman un espectro continuo. En este límite $J(\omega)$ se vuelve una función suave de ω a partir de la cual se expresan $\gamma(t)$ (3.21), ω_R^2 (3.12) y las autocorrelaciones de $\hat{\xi}(t)$ [(3.27) y (3.28)]:

(i)

$$\begin{aligned}
\gamma(t) &= \Theta(t) \frac{2}{\pi m_0} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) \\
\implies \Re[\tilde{\gamma}(\omega)] &= \frac{J(\omega)}{m_0 \omega},
\end{aligned} \tag{3.41}$$

con $\Re[\tilde{\gamma}(\omega)]$ la parte real de la transformada de Fourier de $\gamma(t)$: $\tilde{\gamma}(\omega) = \Re[\tilde{\gamma}(\omega)] + i\Im[\tilde{\gamma}(\omega)]$.

(ii)

$$\omega_{\text{R}}^2 = \frac{2}{\pi m_0} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega}. \quad (3.42)$$

(iii)

$$\begin{aligned} \langle \hat{\xi}(t) \hat{\xi}(t') \rangle_{\hat{\rho}_{\text{B}}} &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \cos[\omega(t-t')] - i \sin[\omega(t-t')] \right] \\ &\quad \text{y} \\ \langle \{\hat{\xi}(t), \hat{\xi}(t')\} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{B}}} &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \cos[\omega(t-t')] \\ \implies \langle \{\tilde{\xi}(\omega), \tilde{\xi}(\omega')\} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{B}}} &= 2\pi m_0 \hbar \omega \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \Re \mathfrak{e}[\tilde{\gamma}(\omega)], \end{aligned} \quad (3.43)$$

con $\tilde{\xi}(\omega)$ la transformada de Fourier del operador de ruido $\hat{\xi}(t)$.

Bajo condiciones de equilibrio térmico, las fluctuaciones de un observable macroscópico de un sistema físico están gobernadas por el teorema de fluctuación-disipación [80, 81], el cual relaciona las características espectrales de las fluctuaciones y la respuesta lineal (es decir, la disipación) del observable [82]. Las expresiones en (3.43) muestran que el baño satisface el teorema de fluctuación-disipación.

Dadas las soluciones (3.35) y la condición inicial $\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)$, y considerando que la transformada de Laplace de $\gamma(t)$ está relacionada con su transformada de Fourier mediante continuación analítica [67]:

$$\mathcal{L}\{\gamma\}(s) = \tilde{\gamma}(\omega = is),$$

se obtiene en el límite continuo que la solución estacionaria para los valores de expectación de $\hat{Q}_0^2(+\infty)$ y $\hat{P}_0^2(+\infty)$ son

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}_0^2(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} &= \frac{\hbar}{\pi m_0} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \Re \mathfrak{e}[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \\ &\quad \text{y} \\ \langle \hat{P}_0^2(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} &= \frac{\hbar m_0}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3 \Re \mathfrak{e}[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right), \end{aligned} \quad (3.44)$$

con $\alpha(\omega) \equiv \omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)$. En el límite de altas temperaturas ($\beta \rightarrow 0$), tomando el término de primer orden de la expansión en serie de

$$\coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) = \frac{2}{\beta \hbar \omega} + \frac{\beta \hbar \omega}{6} - \frac{(\beta \hbar \omega)^3}{360} + \mathcal{O}(\beta^5),$$

el promedio de $\hat{Q}_0^2(+\infty)$ en (3.44) se reduce a [12, 67]

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}_0^2(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} &= \frac{2}{\beta \pi m_0} \int_0^\infty d\omega \frac{\Re \mathfrak{e}[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2} \\ &= \frac{1}{\beta m_0 \omega_0^2}; \end{aligned} \quad (3.45)$$

pues, utilizando las relaciones de Kramers-Kronig [83],

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2} &= \Re \left[\frac{1}{\alpha(0)} \right] \\ &= \frac{1}{\omega_0^2}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

y el valor promedio de $\hat{P}_0^2(+\infty)$ en (3.44) se reduce a

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_0^2(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} &= \frac{2m_0}{\beta\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2 \Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2} \\ &= \frac{m_0}{\beta}; \end{aligned} \quad (3.47)$$

pues, utilizando (3.35), se identifica que

$$[\hat{Q}_0(+\infty), \hat{P}_0(+\infty)] = \frac{2i\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2 \Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2} \quad (3.48)$$

y entonces

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2 \Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2} = 1. \quad (3.49)$$

El detalle de los cálculos para obtener las expresiones (3.46) y (3.48) se encuentran en el Apéndice A. Las igualdades (3.45) y (3.47) (obtenidas para $\beta \rightarrow 0$) implican que

$$\frac{1}{2m_0} \langle \hat{P}_0^2(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} = \frac{m_0 \omega_0^2}{2} \langle \hat{Q}_0^2(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} = \frac{k_B T}{2}, \quad (3.50)$$

lo cual corresponde al teorema de equipartición de energía que se espera en el límite clásico [84].

3.2.2.1. Regularización de Lorentz-Drude

La ecuación de Langevin (3.23) concuerda con una descripción fenomenológica del proceso estocástico que considera tanto los efectos disipativos como las fluctuaciones térmicas inducidos por baño. La naturaleza o características de estos efectos dependerán del modelo que se escoja para representar el comportamiento del baño (óhmico, supra-óhmico o sub-óhmico [85]), lo cual se traduce en una elección particular de la densidad espectral o, equivalentemente, del kernel de memoria-disipación. Además, como físicamente se requiere considerar una escala temporal de memoria en la dinámica, en la elección de $J(\omega)$ se introduce una *frecuencia de corte*, ω_D , que asegura que $J(\omega) \rightarrow 0$ cuando $\omega \rightarrow \infty$, lo cual también evita que ciertas cantidades físicas sufran una divergencia ultravioleta [73, 86, 67, 55]. En la regularización de Lorentz-Drude la densidad espectral corresponde a una densidad espectral óhmica: $J(\omega) \propto \omega$ cuando $\omega \rightarrow 0$, que en términos de la frecuencia de corte se expresa por

$$J_{LD}(\omega) = \frac{2m_0\gamma\omega}{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^2}, \quad (3.51)$$

donde γ es una tasa de amortiguamiento (o fricción). Dada (3.51), la frecuencia de renormalización al cuadrado en el límite continuo (3.42) es

$$\omega_{\text{R}}^2 = 2\gamma\omega_{\text{D}} \quad (3.52)$$

y el kernel de memoria-fricción (3.41) es

$$\gamma_{LD}(t) = 2\gamma\omega_{\text{D}}\theta(t)\exp(-\omega_{\text{D}}t), \quad (3.53)$$

cuya transformada de Fourier es

$$\tilde{\gamma}_{LD}(\omega) = \frac{2\gamma}{1 - i\omega/\omega_{\text{D}}} \quad (3.54)$$

y su transformada de Laplace es

$$\mathcal{L}\{\gamma\}(s) = \frac{2\gamma}{1 + s/\omega_{\text{D}}}. \quad (3.55)$$

Ocupando la siguiente descomposición para la cotangente hiperbólica:

$$\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) = \frac{2}{\beta\hbar\omega} \left(1 + 2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega^2}{\nu_n^2 + \omega^2}\right);$$

con $\nu_n = \frac{2\pi}{\hbar\beta}n$ las llamadas *frecuencias de Matsubara* [86, 67], se obtiene para la función de autocorrelación simetrizada del ruido (3.43) que

$$\begin{aligned} \langle\{\hat{\xi}(t), \hat{\xi}(t')\}\rangle_{\hat{\tau}_{\text{B}}} &= \frac{2\gamma m_0 \omega_{\text{D}}}{\beta} \exp(-\omega_{\text{D}}|t - t'|) + \gamma m_0 \hbar \omega_{\text{D}}^2 \left\{ \exp(-\omega_{\text{D}}|t - t'|) \left[\psi^{(0)}\left(1 - \frac{\omega_{\text{D}}}{\nu_1}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \psi^{(0)}\left(1 + \frac{\omega_{\text{D}}}{\nu_1}\right) \right] + \exp(-\nu_1|t - t'|) \left[\Phi\left(\exp(-\nu_1|t - t'|), 1, 1 - \frac{\omega_{\text{D}}}{\nu_1}\right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \Phi\left(\exp(-\nu_1|t - t'|), 1, 1 + \frac{\omega_{\text{D}}}{\nu_1}\right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.56)$$

donde $\psi^{(0)}(x)$ es la función digamma y $\Phi(z, s, a)$ es la función trascendente de Lerch. En el límite clásico ($\hbar \rightarrow 0$) y tomando $t' = 0$, la expresión (3.56) se aproxima a la relación no Markoviana de Einstein [73, 87]:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle\{\hat{\xi}(t), \hat{\xi}(0)\}\rangle_{\hat{\rho}_{\text{B}}^{\text{tco}}} = \frac{m_0}{\beta} \gamma_{LD}(t); \quad \text{con } t > 0, \quad (3.57)$$

pues

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \left[\psi^{(0)}\left(1 - \frac{\omega_{\text{D}}}{\nu_1}\right) - \psi^{(0)}\left(1 + \frac{\omega_{\text{D}}}{\nu_1}\right) \right] = 0$$

y

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \exp(-\nu_1 t) \left[\Phi\left(\exp(-\nu_1 t), 1, 1 - \frac{\omega_{\text{D}}}{\nu_1}\right) + \Phi\left(\exp(-\nu_1 t), 1, 1 + \frac{\omega_{\text{D}}}{\nu_1}\right) \right] = 0.$$

Cuando las frecuencias relevantes del sistema son mucho menores que ω_D , el baño descrito por la densidad espectral (3.51) se comporta, salvo inicialmente, como un baño térmico estrictamente óhmico ($\omega_D \rightarrow +\infty$) con

$$J(\omega) = 2m_0\gamma\omega \quad (3.58)$$

y una tasa de amortiguamiento efectiva

$$\gamma_{\text{ef}} = \int_0^\infty dt \gamma_{LD}(t) = 2\gamma. \quad (3.59)$$

No obstante, a escalas temporales menores a

$$\tau_D = \frac{1}{\gamma_{\text{ef}}} \int_0^\infty dt t \gamma_{LD}(t) = \frac{1}{\omega_D}, \quad (3.60)$$

el kernel $\gamma_{LD}(t)$ presenta efectos de memoria (no Markovianidad), los cuales gobiernan gran parte de la dinámica si las escalas relevantes del sistema no son (mucho) menores que ω_D [67, 86].

3.2.2.2. Estado estacionario del oscilador central

En el cuadro de Schrödinger, la evolución reducida (no unitaria) del estado del oscilador central queda representada por el operador densidad dependiente del tiempo $\hat{\rho}_S(t) \equiv \text{Tr}_B [\hat{\rho}_{\text{tot}}(t)]$, donde $\hat{\rho}_{\text{tot}}(t)$ es el estado del sistema compuesto a tiempo t resultante de la evolución unitaria

$$\hat{\rho}_{\text{tot}}(t) = \hat{U}_{\text{CL}}(t) \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \hat{U}_{\text{CL}}^\dagger(t), \quad (3.61)$$

con $\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)$ el estado inicial (3.37) y \hat{U}_{CL} satisfaciendo [ver (1.34)]

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{U}_{\text{CL}}(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{\text{CL}} \hat{U}_{\text{CL}}(t) \\ \implies \hat{U}_{\text{CL}}(t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{\text{CL}} t\right). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Como consecuencia de la evolución (3.61), el estado $\hat{\rho}_{\text{tot}}(t)$ contiene correlaciones entre el oscilador central y el baño cuya naturaleza (coherencias, entrelazamiento, etc) dependerán del estado inicial del oscilador central, $\hat{\rho}_S(0)$ [88]. Si inicialmente el estado del oscilador central, $\hat{\rho}_S(0)$, es un estado Gaussiano, entonces el estado inicial $\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)$ es Gaussiano y por lo tanto los estados $\hat{\rho}_{\text{tot}}(t)$ y $\hat{\rho}_S(t)$ serán Gaussianos $\forall t$. No obstante, independientemente de la Gaussianidad de $\hat{\rho}_S(0)$ y dado que \hat{H}_{CL} es un Hamiltoniano puramente cuadrático en sus operadores canónicos, el estado estacionario del oscilador central, $\hat{\rho}_S(+\infty) = \text{Tr}_B [\hat{\rho}_{\text{tot}}(+\infty)]$, en el límite continuo es único y Gaussiano[§] [90, 91, 92, 70, 12], con primeros momentos nulos [ver (3.38)] y elementos no diagonales de su MC, $\sigma_S(+\infty)$, también nulos [ver (3.39)]. Salvo

[§]En Hu et al. [85] se deduce vía el método de integral de camino una ecuación maestra exacta para el operador densidad reducido del oscilador central a partir de la cual en Halliwell et al. [89] se deduce una ecuación estocástica para la función de Wigner reducida. En Ford et al. [90] se reporta la solución de la ecuación estocástica para la función de Wigner reducida, la cual en el límite $t \rightarrow +\infty$ es una función de Wigner Gaussiana que depende únicamente de la matriz de covarianza.

un factor 2, las expresiones estacionarias en (3.44) corresponden a los elementos diagonales de $\sigma_S(+\infty)$, es decir,

$$\sigma_S(+\infty) \equiv 2 \begin{pmatrix} \langle \hat{Q}_0^2 \rangle_{\hat{\rho}_S(+\infty)} & 0 \\ 0 & \langle \hat{P}_0^2 \rangle_{\hat{\rho}_S(+\infty)} \end{pmatrix}, \quad (3.63)$$

pues

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}_0^2 \rangle_{\hat{\rho}_S(+\infty)} &\equiv \text{Tr}_S \left[\hat{Q}_0^2(0) \hat{\rho}_S(+\infty) \right] \\ &= \text{Tr} \left[\hat{Q}_0^2(0) \hat{U}_{\text{CL}}(+\infty) \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \hat{U}_{\text{CL}}^\dagger(+\infty) \right] \\ &= \text{Tr} \left[\hat{U}_{\text{CL}}^\dagger(+\infty) \hat{Q}_0(0) \hat{U}_{\text{CL}}(+\infty) \hat{U}_{\text{CL}}^\dagger(+\infty) \hat{Q}_0(0) \hat{U}_{\text{CL}}(+\infty) \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \right] \\ &= \text{Tr} \left[\hat{Q}_0^2(+\infty) \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \right] \\ &\equiv \langle \hat{Q}_0^2(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_0^2 \rangle_{\hat{\rho}_S(+\infty)} &\equiv \text{Tr}_S \left[\hat{P}_0^2(0) \hat{\rho}_S(+\infty) \right] \\ &= \text{Tr} \left[\hat{P}_0^2(+\infty) \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \right] \\ &\equiv \langle \hat{P}_0^2(+\infty) \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)}, \end{aligned} \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned} \langle \{\hat{Q}_0, \hat{P}_0\} \rangle_{\hat{\rho}_S(+\infty)} &= \text{Tr}_S \left[\{\hat{Q}_0(0), \hat{P}_0(0)\} \hat{\rho}_S(+\infty) \right] \\ &= \text{Tr} \left[\{\hat{Q}_0(+\infty), \hat{P}_0(+\infty)\} \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \right] \\ &\equiv \langle \{\hat{Q}_0(+\infty), \hat{P}_0(+\infty)\} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.66)$$

y

$$\begin{aligned} \langle \{\hat{P}_0, \hat{Q}_0\} \rangle_{\hat{\rho}_S(+\infty)} &= \text{Tr}_S \left[\{\hat{P}_0(0), \hat{Q}_0(0)\} \hat{\rho}_S(+\infty) \right] \\ &= \text{Tr} \left[\{\hat{P}_0(+\infty), \hat{Q}_0(+\infty)\} \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) \right] \\ &\equiv \langle \{\hat{P}_0(+\infty), \hat{Q}_0(+\infty)\} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.67)$$

En general –considérese el régimen de acoplamiento fuerte [56]–

$$\hat{\rho}_S(+\infty) \neq \frac{\exp(-\beta \hat{H}_S)}{\text{Tr}_S[\exp(-\beta \hat{H}_S)]},$$

pero si se cumpliesen condiciones de acoplamiento débil [73, 93] entre el oscilador central y el baño, la evolución del estado reducido del oscilador central en el límite termodinámico y régimen Markoviano obedece una ecuación tipo Lindblad (a.k.a. *GKSL equation*) cuyo estado estacionario es $\hat{\rho}_S(+\infty) = \exp(-\beta \hat{H}_S) / \text{Tr}_S[\exp(-\beta \hat{H}_S)]$ [55, 57, 94], el cual está caracterizado por la MC

$$\sigma_S(+\infty) = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{m_0 \omega_0} & 0 \\ 0 & m_0 \omega_0 \end{pmatrix} \coth(\beta \hbar \omega_0 / 2). \quad (3.68)$$

Eligiendo la regularización de Lorentz-Drude en las expresiones integrales de las entradas diagonales de $\sigma_S(+\infty)$ [ver (3.44)], se puede mostrar que tomando el límite $\gamma \rightarrow 0$ la MC $\sigma_S(+\infty)$ se reduce a la MC (3.68) asociada al estado de equilibrio térmico $\exp(-\beta\hat{H}_S)/\text{Tr}_S[\exp(-\beta\hat{H}_S)]$ [12].

Para finalizar esta sección, vale la pena hacer notar que la evolución (3.61) es equivalente a la evolución generada por \hat{H}_{CL} de cualquier operador del sistema compuesto en el cuadro de Heisenberg, por ejemplo, la descrita por la ecuación de Langevin para el operador \hat{Q}_0 .

3.3. Teoría de respuesta lineal

Una particularidad del modelo CL es que el estado reducido estacionario del oscilador central en el límite termodinámico, $\hat{\rho}_S(+\infty)$, coincide con un estado llamado *estado Gibbsiano de fuerza media*, del cual se hablará más adelante en esta sección. Para deducir esta igualdad entre los estados, es útil introducir los principios de la teoría de respuesta lineal, cuya ventaja es posibilitar el cálculo de cantidades asociadas al equilibrio térmico global. En teoría de respuesta lineal se estudia la respuesta a orden lineal de un sistema a una fuerza externa, $f_{\text{ext}}(t)$, cuando esta le induce una perturbación que lo desplaza del equilibrio termodinámico [95, 67, 86, 55]. Al Hamiltoniano \hat{H} de un sistema aislado se le agrega un término perturbativo $-\hat{q}f_{\text{ext}}(t)$, definiendo así un Hamiltoniano dependiente del tiempo

$$\hat{H}(t) \equiv \hat{H} - \hat{q}f_{\text{ext}}(t) \quad (3.69)$$

que gobierna la dinámica desde cuando $f_{\text{ext}}(t)$ actúa sobre el sistema. \hat{q} es un operador que actúa sobre el espacio de Hilbert del sistema aislado y $f_{\text{ext}}(t)$ se enciende cuando el sistema está en el estado térmico

$$\hat{\rho}_{\text{tco}} = \frac{\exp(-\beta\hat{H})}{\text{Tr}[\exp(-\beta\hat{H})]} \quad (3.70)$$

con un inverso de la temperatura β . Luego, en primer lugar, como la fuerza perturbativa se considera pequeña, se asume que el cambio en el valor de expectación de cualquier observable \hat{O} del sistema es lineal en la fuerza, es decir,

$$\begin{aligned} \Delta\langle\hat{O}(t)\rangle &\equiv \langle\hat{O}(t)\rangle_{\hat{\rho}} - \langle\hat{O}\rangle_{\hat{\rho}_{\text{tco}}} \\ &= \int_0^\infty dt' \chi_{\hat{O}\hat{q}}(t-t')f_{\text{ext}}(t'), \end{aligned} \quad (3.71)$$

donde a $\chi_{\hat{O}\hat{q}}(t)$ se le conoce como *función respuesta causal*. $\langle\hat{O}(t)\rangle_{\hat{\rho}}$ es el valor de expectación del operador \hat{O} con respecto al estado $\hat{\rho}(t > 0)$ del sistema perturbado y $\langle\hat{O}\rangle_{\hat{\rho}_{\text{tco}}}$ es el valor de expectación del operador \hat{O} con respecto al estado no perturbado $\hat{\rho}_{\text{tco}}$, es decir, el estado cuando $f_{\text{ext}}(t \leq 0) = 0$. En segundo lugar, si se hace explícitamente el cálculo de $\langle\hat{O}(t)\rangle_{\hat{\rho}}$ a

primer orden en la perturbación se obtiene que

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O}(t) \rangle_{\hat{\rho}} &\equiv \text{Tr} \left[\hat{O} \hat{\rho}(t) \right] \\
&= \text{Tr} \left[\hat{\rho}_{\text{I}}(t) \hat{O}_{\text{I}}(t) \right] \\
&= \text{Tr} \left[\hat{\rho}_{\text{I}}(0) \hat{U}_{\text{I}}^\dagger \hat{O}_{\text{I}} \hat{U}_{\text{I}}(t) \right] \\
&\approx \text{Tr} \left[\hat{\rho}_{\text{tco}} \left(\hat{\mathbb{I}} + \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{q}_{\text{I}}(t') f_{\text{ext}}(t') \right) \hat{O}_{\text{I}}(t) \left(\hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{q}_{\text{I}}(t') f_{\text{ext}}(t') \right) \right] \quad (3.72) \\
&\approx \text{Tr} \left[\hat{\rho}_{\text{tco}} \left(\hat{O}_{\text{I}}(t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\hat{O}_{\text{I}}(t), \hat{q}_{\text{I}}(t')] \right) \right] \\
&= \langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tco}}} + \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt' \theta(t-t') \langle [\hat{O}(t-t'), \hat{q}(0)] \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tco}}},
\end{aligned}$$

donde $\hat{O}_{\text{I}}(t)$ y $\hat{q}_{\text{I}}(t')$ corresponden al operador \hat{O} y al operador \hat{q} en el cuadro de interacción[¶], $\hat{\rho}_{\text{I}}(t)$ y $\hat{\rho}_{\text{I}}(0) = \hat{\rho}_{\text{tco}}$ son los estados perturbado y no perturbado en el cuadro de interacción y \hat{U}_{I} es el operador de evolución en el cuadro de interacción, el cual está representado por el operador

$$\hat{U}_{\text{I}}(t) = \mathcal{T} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{O}_{\text{I}}(t') f_{\text{ext}}(t') \right) \quad (3.73)$$

que satisface la ecuación

$$\frac{d\hat{U}_{\text{I}}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \hat{O}_{\text{I}}(t) f_{\text{ext}}(t) \hat{U}_{\text{I}}(t)$$

y que a primer orden se expresa por

$$\hat{U}_{\text{I}}(t) = \hat{\mathbb{I}} + \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{O}_{\text{I}}(t') f_{\text{ext}}(t'). \quad (3.74)$$

Al igualar las expresiones (3.71) y (3.72), se reconoce que la función respuesta causal se expresa por

$$\chi_{\hat{O}\hat{q}}(t-t') = \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle [\hat{O}(t-t'), \hat{q}(0)] \rangle_{\hat{\rho}_{\text{tco}}}, \quad (3.75)$$

la cual es conocida como la *fórmula de Kubo* [96]. Esta fórmula es de utilidad para calcular los valores de expectación asociados a los operadores del oscilador central con respecto al estado de equilibrio térmico global.

3.3.1. Funciones de correlación y valores de expectación en el equilibrio térmico del modelo CL

La teoría de respuesta lineal es exacta para sistemas lineales como el oscilador armónico amortiguado [86]. Si en particular se considera que el Hamiltoniano dependiente del tiempo

[¶]En el cuadro de interacción tanto los estados de un sistema como sus observables evolucionan en el tiempo. En este cuadro el estado de un sistema se representa por $\hat{\rho}_{\text{I}}(t) = \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \hat{\rho}_{\text{Sch}}(t) \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar)$ y un operador se representa por $\hat{O}_{\text{I}}(t) = \exp(i\hat{H}_0 t/\hbar) \hat{O}_{\text{Sch}}(t) \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar)$; donde $\hat{\rho}_{\text{Sch}}$ y \hat{O}_{Sch} son el estado del sistema y un operador en el cuadro de Schrödinger, respectivamente, y \hat{H}_0 es el Hamiltoniano libre del sistema que forma parte del Hamiltoniano dependiente del tiempo $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$, con $V(t)$ un potencial dependiente del tiempo (en general perturbativo) [41].

debido a la perturbación es

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_{\text{CL}} - \hat{Q}_0 f_{\text{ext}}(t), \quad (3.76)$$

entonces \hat{Q}_0 obedece la ecuación de Langevin

$$\frac{d^2 \hat{Q}_0(t)}{dt^2} + \int_0^t dt' \gamma(t-t') \frac{d\hat{Q}_0(t')}{dt'} + \omega_0 \hat{Q}_0(t) = \frac{\hat{\xi}(t)}{m_0} + \frac{f_{\text{ext}}(t)}{m_0} - \gamma(t) \hat{Q}_0(0), \quad (3.77)$$

donde $\gamma(t)$ y $\hat{\xi}(t)$ son el kernel de memoria-fricción y el operador de ruido, respectivamente, de la ecuación de Langevin (3.23). Luego, al aplicar $\langle \cdot \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \equiv \text{Tr}[\cdot \hat{\tau}_{\text{tot}}]$ a (3.77); donde

$$\hat{\tau}_{\text{tot}} = \frac{\exp(-\beta \hat{H}_{\text{CL}})}{\text{Tr}[\exp(-\beta \hat{H}_{\text{CL}})]} \quad (3.78)$$

es el estado inicial no perturbado del sistema compuesto, y considerando que los primeros momentos de un estado térmico con Hamiltoniano puramente cuadrático son nulos [ver 1.26], por lo que

$$\text{Tr}[\hat{\xi}(t) \hat{\tau}_{\text{tot}}] = 0 \quad \text{y} \quad \text{Tr}[\hat{Q}_0(0) \hat{\tau}_{\text{tot}}] = 0,$$

se deduce que el valor de expectación de \hat{Q}_0 obedece la ecuación de movimiento clásica (teorema de Ehrenfest)

$$\frac{d^2 \langle \hat{Q}_0(t) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}}{dt^2} + \int_0^t dt' \gamma(t-t') \frac{d \langle \hat{Q}_0(t') \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}}{dt'} + \omega_0 \langle \hat{Q}_0(t) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} = \frac{f_{\text{ext}}(t)}{m_0}, \quad (3.79)$$

con $\langle \hat{Q}_0(t) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \equiv \text{Tr}[\hat{Q}_0(t) \hat{\tau}_{\text{tot}}] = \text{Tr}[\hat{Q}_0(0) \hat{\rho}(t)] \equiv \langle \hat{Q}_0(t) \rangle_{\hat{\rho}}$ [ver (3.72)]. Reemplazando la expresión integral (3.71) en la ecuación (3.79) se obtiene que la función respuesta causal $\chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}(t)$ obedece la ecuación diferencial

$$\frac{d^2 \chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}(\tau)}{d\tau^2} + \int_0^\tau du \gamma(\tau-u) \frac{d\chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}(u)}{du} + \omega_0^2 \chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}(\tau) = 0, \quad (3.80)$$

de la cual se desprende que la transformada de Fourier de $\chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}$ –llamada *suceptibilidad dinámica* [86, 67]– es^{||}

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}(\omega) &\equiv \Re[\tilde{\chi}(\omega)] + i \Im[\tilde{\chi}(\omega)] \\ &= \frac{1}{m_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)} \end{aligned} \quad (3.81)$$

$$\implies \Im[\tilde{\chi}(\omega)] = \frac{1}{m_0} \frac{\omega \Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)|^2}. \quad (3.82)$$

Ahora, introduciendo convenientemente las funciones de autocorrelación [67]

$$\begin{aligned} C^+(\tau) &\equiv \langle \hat{Q}_0(\tau) \hat{Q}_0(0) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \\ &\quad \text{y} \\ C^-(\tau) &\equiv \langle \hat{Q}_0(0) \hat{Q}_0(\tau) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}, \end{aligned} \quad (3.83)$$

^{||} $\tilde{\chi}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}(\tau) \exp(i\omega\tau) = \mathcal{L}\{\chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}\}(-i\omega)$, con $\mathcal{L}\{\chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}\}(s) = \int_0^{\infty} d\tau \exp(-s\tau) \chi_{\hat{Q}_0 \hat{Q}_0}(\tau)$ [86].

con $C^\pm(\tau) = S(\tau) \pm iA(\tau)$; donde

$$\begin{aligned} S(\tau) &= S(-\tau) = \frac{1}{2} \langle \{\hat{Q}_0(\tau), \hat{Q}_0(0)\} \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \\ &\quad \text{y} \\ A(\tau) &= -A(-\tau) = \frac{1}{2i} \langle [\hat{Q}_0(\tau), \hat{Q}_0(0)] \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}, \end{aligned} \quad (3.84)$$

luego del cálculo detallado en el Apéndice B, se concluye que

$$S(\tau) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \Im[\tilde{\chi}(\omega)] \cos \omega\tau. \quad (3.85)$$

Este resultado surge como consecuencia de que el espectro de las fluctuaciones con respecto al equilibrio, $\tilde{S}(\omega)$, se expresa en términos de la parte imaginaria de la transformada de Fourier de la función respuesta causal, $\Im[\tilde{\chi}(\omega)]$, es decir, se satisface el teorema de fluctuación-disipación,

$$\tilde{S}(\omega) = \hbar \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \Im[\tilde{\chi}(\omega)];$$

con $\tilde{S}(\omega) = [\tilde{C}^+(\omega) + \tilde{C}^-(\omega)]/2$ y $\tilde{C}^\pm(\omega) \equiv \int_{-\infty}^\infty d\tau \exp(i\omega\tau) C^\pm(\tau) = \tilde{S}(\omega) \pm i\tilde{A}(\omega)$ [55, 67]. A partir de las expresiones para $S(\tau)$ en (3.84) y en el resultado (3.85), se desprende que los valores de expectación de $\hat{Q}_0^2(0)$, $\{\hat{Q}_0(0), \hat{P}_0(0)\} = \{\hat{P}_0(0), \hat{Q}_0(0)\}$ y $\hat{P}_0^2(0)$ con respecto al estado térmico (3.78) son:

(a)

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}_0^2(0) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} &= S(0) \\ &= \frac{\hbar}{\pi m_0} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)|^2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right), \end{aligned} \quad (3.86)$$

donde para la segunda igualdad se evaluó $\tau = 0$ en la función coseno del integrando en (3.85).

(b)

$$\begin{aligned} \langle \{\hat{Q}_0(0), \hat{P}_0(0)\} \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} &= \langle \{\hat{P}_0(0), \hat{Q}_0(0)\} \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \\ &= m_0 \frac{d}{d\tau} \left[\langle \{\hat{Q}_0(\tau), \hat{Q}_0(0)\} \rangle \right]_{\tau=0} \\ &= 2m_0 \left. \frac{dS(\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=0} \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.87)$$

donde para la última igualdad se evaluó $\tau = 0$ en la función seno del integrando de la derivada con respecto a τ de la expresión (3.85).

(c)

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_0^2(0) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} &= -m_0^2 \left. \frac{d^2 S(\tau)}{d\tau^2} \right|_{\tau=0} \\ &= \frac{\hbar m_0}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3 \Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)|^2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right), \end{aligned} \quad (3.88)$$

donde la primera igualdad en (3.88) se desprende, por ejemplo, de considerar que el sistema compuesto perturbado por la fuerza externa $f_{\text{ext}}(\tau)$ en el Hamiltoniano $\hat{H}(\tau)$ (3.76) es un sistema cerrado cuyo estado a tiempo τ , $\hat{\rho}(\tau)$, satisface en el cuadro de Schrödinger la ecuación de Liouville-von Neumann [55] y entonces su derivada evaluada en $t = 0$ es nula,

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\hat{\rho}(\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=0} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}(0), \hat{\rho}(0)] \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{\text{CL}}, \hat{\tau}_{\text{tot}}] \\ &= 0, \end{aligned}$$

lo cual implica que

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \left[\langle \{ \hat{P}_0(\tau), \hat{Q}_0(\tau) \} \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \right]_{\tau=0} &= \frac{d}{d\tau} \left[\langle \{ \hat{P}_0(0), \hat{Q}_0(0) \} \rangle_{\hat{\rho}(\tau)} \right]_{\tau=0} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.89)$$

y por lo tanto, derivando dos veces la expresión para $S(\tau)$ en (3.84), se obtiene que

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2 S(\tau)}{d\tau^2} \right|_{\tau=0} &= \frac{1}{2m_0} \langle \left\{ \left. \frac{d\hat{P}_0(\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=0}, \hat{Q}_0(0) \right\} \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \\ &= -\frac{1}{m_0^2} \langle \hat{P}_0^2(0) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}. \end{aligned}$$

La segunda igualdad en (3.88) se obtiene derivando dos veces con respecto a τ la expresión (3.85) y evaluando la función coseno en $\tau = 0$.

3.3.2. Estado Gibbsiano de fuerza media

Debido a que el estado térmico $\hat{\tau}_{\text{tot}}$ (3.78) es un estado Gaussiano, entonces el estado reducido

$$\hat{\omega}_{\text{FM}} \equiv \text{Tr}_{\text{B}} \left[\frac{\exp(-\beta \hat{H}_{\text{CL}})}{\text{Tr}[\exp(-\beta \hat{H}_{\text{CL}})]} \right]$$

es un estado Gaussiano, el cual está totalmente caracterizado por los valores de expectación con respecto al estado de equilibrio térmico (3.86) y (3.88). El estado $\hat{\omega}_{\text{FM}}$ corresponde al estado Gibbsiano de fuerza media del oscilador central [7, 56]. Como $\langle \{ \hat{Q}_0(0), \hat{P}_0(0) \} \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} = \langle \{ \hat{P}_0(0), \hat{Q}_0(0) \} \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} = 0$ [ver (3.87)], la MC asociada a $\hat{\omega}_{\text{FM}}$ es

$$\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}} = 2 \begin{pmatrix} \langle \hat{Q}_0^2(0) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} & 0 \\ 0 & \langle \hat{P}_0^2(0) \rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \end{pmatrix}, \quad (3.90)$$

la cual es exactamente idéntica [ver y comparar expresiones en (3.44) con (3.86) y (3.88)] a la MC $\sigma_{\text{S}}(+\infty)$ (3.63) asociada al estado estacionario Gaussiano $\hat{\rho}_{\text{S}}(+\infty)$, la cual fue obtenida a partir del resultado de la ecuación de Langevin (3.23) con condición inicial producto entre el

estado inicial del oscilador central y el estado térmico del baño (3.37). Ambos estados poseen primeros momentos nulos, en efecto, se concluye que el estado estacionario y el estado de fuerza media son idénticos, es decir,

$$\hat{\omega}_{\text{FM}} = \hat{\rho}_{\text{S}}(+\infty). \quad (3.91)$$

El estado Gibbsiano de fuerza media posee una representación explícita como operador densidad dada por [97, 73]

$$\hat{\omega}_{\text{FM}} = \frac{\exp\left(-\beta\hat{H}_{\text{ef}}\right)}{Z_{\text{eq}}}, \quad (3.92)$$

donde Z_{ef} es una constante de normalización expresada por

$$Z_{\text{eq}} = \frac{1}{2 \sinh(\beta\hbar\omega_{\text{ef}}/2)}$$

y

$$\hat{H}_{\text{ef}} = \frac{\hat{P}_0^2}{2m_{\text{ef}}} + \frac{m_{\text{ef}}\omega_{\text{ef}}^2}{2}\hat{Q}_0^2$$

es un Hamiltoniano efectivo que depende –al igual que Z_{eq} – de la frecuencia efectiva

$$\omega_{\text{ef}} = \frac{1}{\hbar\beta} \ln \left[\frac{\sqrt{\langle\hat{P}_0^2(0)\rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}\langle\hat{Q}_0^2(0)\rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} + \frac{\hbar}{2}}}{\sqrt{\langle\hat{P}_0^2(0)\rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}\langle\hat{Q}_0^2(0)\rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} - \frac{\hbar}{2}}} \right]$$

y de la masa efectiva

$$m_{\text{ef}} = \frac{1}{\omega_{\text{ef}}} \sqrt{\frac{\langle\hat{P}_0^2(0)\rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}}{\langle\hat{Q}_0^2(0)\rangle_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}}},$$

ambas dependientes de β y que en el límite de altas temperaturas ($\beta \rightarrow 0$) cumplen que $\omega_{\text{ef}} \rightarrow \omega_0$ y $m_{\text{ef}} \rightarrow m_0$, lo cual implica $\hat{\omega}_{\text{FM}} \rightarrow \exp(-\beta\hat{H}_{\text{S}})/\text{Tr}_{\text{S}}[\exp(-\beta\hat{H}_{\text{S}})]$.

3.4. Evolución simpléctica

Haciendo uso del formalismo simpléctico se plantea implementar numéricamente la evolución temporal del sistema compuesto del modelo CL para un valor de N que reproduzca (en lo posible) el límite termodinámico. Se busca obtener la MC del oscilador central en su estado de equilibrio –estacionario en el límite termodinámico– y comparar con los resultados obtenidos desde la ecuación de Langevin. La condición inicial de la evolución es el estado del sistema compuesto del modelo CL (3.11) representado por el operador densidad producto (3.37),

$$\hat{\rho}_{\text{CL}}(0) = \hat{\rho}_{\text{S}}(0) \otimes \hat{\tau}_{\text{B}}, \quad (3.93)$$

donde $\hat{\rho}_{\text{S}}(0)$ es un estado Gaussiano con primeros momentos nulos. Luego, la evolución del sistema compuesto queda totalmente representada por la evolución simpléctica

$$\sigma_{\text{CL}}(t) = \mathbf{S}(t)\sigma_{\text{CL}}(0)\mathbf{S}(t)^{\text{T}} \quad (3.94)$$

de la MC del estado (3.93),

$$\sigma_{\text{CL}}(0) = \sigma_{\text{S}}(0) \oplus \left[\bigoplus_{j=1}^N \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{m_j \omega_j} & 0 \\ 0 & m_j \omega_j \end{pmatrix} \coth \left(\frac{\beta \hbar \omega_j}{2} \right) \right], \quad (3.95)$$

por medio de la acción de la matriz simpléctica [ver (1.33)]

$$\mathbf{S}(t) = \exp(2\Omega \mathbf{H}_{\text{CL}} t), \quad (3.96)$$

con

$$\mathbf{H}_{\text{CL}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} m_0(\omega_0^2 + \omega_{\text{R}}^2) & 0 & -g_1 & 0 & \cdots & -g_N & 0 \\ 0 & 1/m_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -g_1 & 0 & m_1 \omega_1^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/m_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -g_N & 0 & 0 & 0 & \cdots & m_N \omega_N^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1/m_N \end{pmatrix} \quad (3.97)$$

la matriz Hamiltoniana del operador \hat{H}_{CL} ; la cual no posee dependencia temporal explícita. Dada la MC (3.94) del sistema compuesto, el estado del oscilador central al tiempo t queda representado por la MC

$$\sigma_{\text{S}}(t) \equiv \begin{pmatrix} [\sigma_{\text{CL}}(t)]_{11} & [\sigma_{\text{CL}}(t)]_{12} \\ [\sigma_{\text{CL}}(t)]_{21} & [\sigma_{\text{CL}}(t)]_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.98)$$

Cuando $\hat{\rho}_{\text{S}}(0)$ no es un estado Gaussiano, la evolución (3.94) solo describe la evolución de la matriz de covarianza asociada al estado del sistema compuesto.

3.4.1. Baño finito

La evolución simpléctica (3.94) requiere definir una muestra finita de frecuencias $\{\omega_k\}_{k=1}^N$ de los osciladores del baño como también de los acoplamientos $\{g_k\}_{k=1}^N$ [ver (3.97)]. La muestra de frecuencias a usar, como también los demás parámetros del Hamiltoniano, determinan el tiempo a la que ocurren las recurrencias de Poincaré en la dinámica. El tiempo de las recurrencias de Poincaré es proporcional a $2\pi / \text{mín}(\tilde{\omega}_{k+1} - \tilde{\omega}_k)$, donde $\tilde{\omega}_k$ son las frecuencias de los modos normales del sistema compuesto [98, 92].

3.4.1.1. Muestra homogénea de frecuencias

Una elección sencilla para representar las frecuencias del baño es considerar una muestra homogénea en que se escoge una frecuencia máxima, $\omega_{\text{máx}}$, y se define una diferencia constante entre frecuencias como $\Delta \equiv \omega_{\text{máx}}/N$. De esta forma, la frecuencia del j -ésimo oscilador ($j = 1, \dots, N$) se expresa por

$$\omega_j^{Hm} = j\Delta. \quad (3.99)$$

Como N y $\omega_{\text{máx}}$ son parámetros libres, estos se pueden ajustar para reproducir el límite continuo. En la regularización de Lorentz-Drude (3.51), la densidad espectral en términos

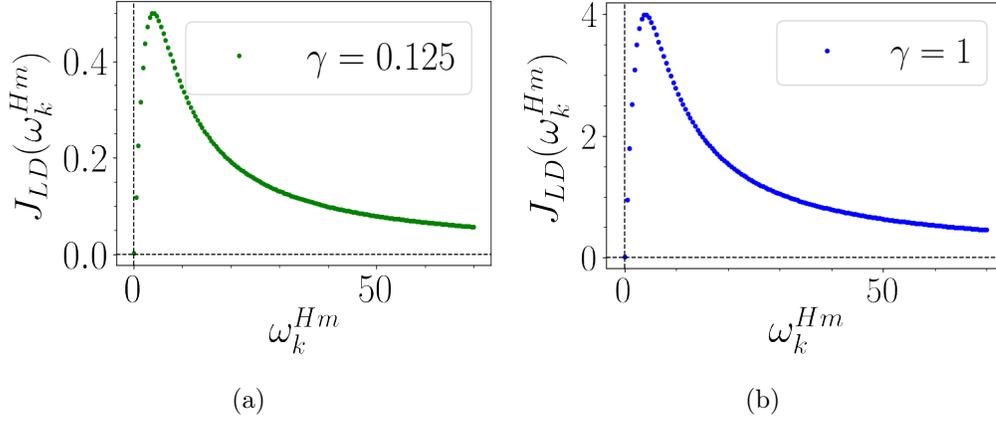


Figura 3.1: Densidad espectral con regularización de Lorentz-Drude en función de una muestra homogénea de frecuencias donde $N = 150$, $m_0 = 1$, $m_k = 1 \forall k$, $\omega_{\text{máx}} = 70$ y $\omega_D = 4$. (a) $\gamma = 0.125$ y (b) $\gamma = 1$.

de una muestra homogénea de frecuencias es un conjunto de puntos equiespaciados con un máximo entorno a ω_D y que decae hasta su valor dado por $\omega_{\text{máx}}$ [Figura 3.1].

Para los acoplamientos g_k se busca reproducir una densidad espectral de un baño con espectro continuo. Integrando $J(\omega)$ (3.40) en una vecindad de ω_j , $[\omega_j - \Delta/2, \omega_j + \Delta/2]$ (con $\Delta \ll 1$), se obtiene que

$$\int_{\omega_j - \Delta/2}^{\omega_j + \Delta/2} d\omega J(\omega) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \frac{g_k^2}{m_k \omega_k} & \text{si } \omega_k \in [\omega_j - \Delta/2, \omega_j + \Delta/2] \\ 0 & \text{si } \omega_k \notin [\omega_j - \Delta/2, \omega_j + \Delta/2] \end{cases}, \quad (3.100)$$

y considerando a $J(\omega)$ una función continua y suave, como por ejemplo (3.51), al integrar en el intervalo $[\omega_j - \Delta/2, \omega_j + \Delta/2]$ se obtiene que

$$\int_{\omega_j - \Delta/2}^{\omega_j + \Delta/2} d\omega J(\omega) \approx J(\omega_j) \Delta. \quad (3.101)$$

Luego, igualando (3.100) y (3.101) generamos la muestra de acoplamientos como

$$g_k^{Hm} \approx \sqrt{\frac{2m_k \omega_k J(\omega_k) \Delta}{\pi}}, \quad (3.102)$$

que para el caso de la regularización de Lorentz-Drude quedan

$$g_k^{Hm} \approx \sqrt{\frac{4\gamma m_0 m_k \omega_k^2 \Delta}{\pi [1 + (\omega_k/\omega_D)^2]}}. \quad (3.103)$$

Para una muestra homogénea de frecuencias (3.99) y un tamaño finito del baño (N) se tiene que la escala temporal de las recurrencias de Poincaré [Figuras 3.2 y 3.3] en la evolución (3.98) del oscilador central está dada aproximadamente por $t_{\mathcal{R}} = 2\pi N/\omega_{\text{máx}}$ [92, 66], lo cual limita la ventana temporal de estudio si es que se quiere observar el fenómeno de equilibrio

$$\gamma = 0.08$$

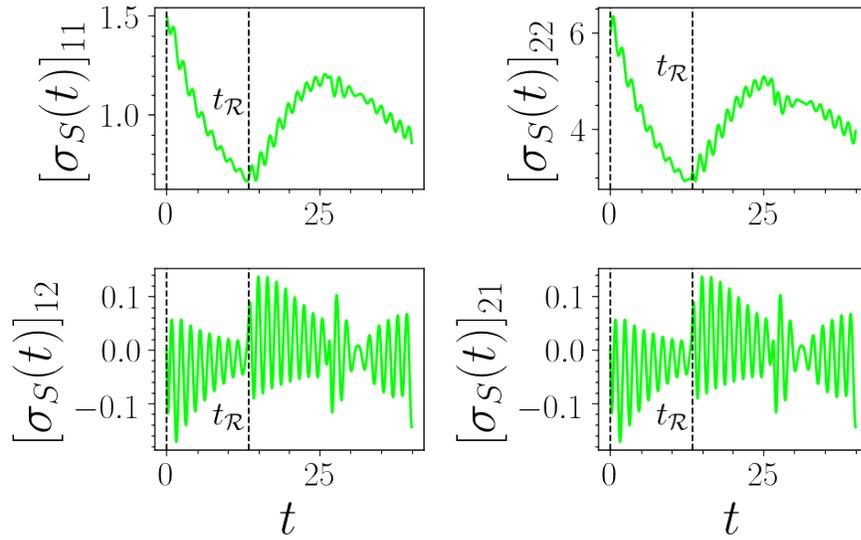


Figura 3.2: Entradas de la MC $\sigma_S(t)$ (3.98) en función del tiempo según la evolución simpléctica (3.94) con una muestra homogénea de frecuencias. Se considera como condición inicial la MC $\sigma_S(0)$ del oscilador central asociada al primer estado excitado $\hat{\rho}_S(0) = |1\rangle\langle 1|$ y se escogen los parámetros $\gamma = 0.08$, $N = 150$, $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$, $\beta = 10$, $m_0 = 1$, $m_k = 1 \forall k$, $\omega_{\text{máx}} = 70$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's.

$$\gamma = 1.0$$

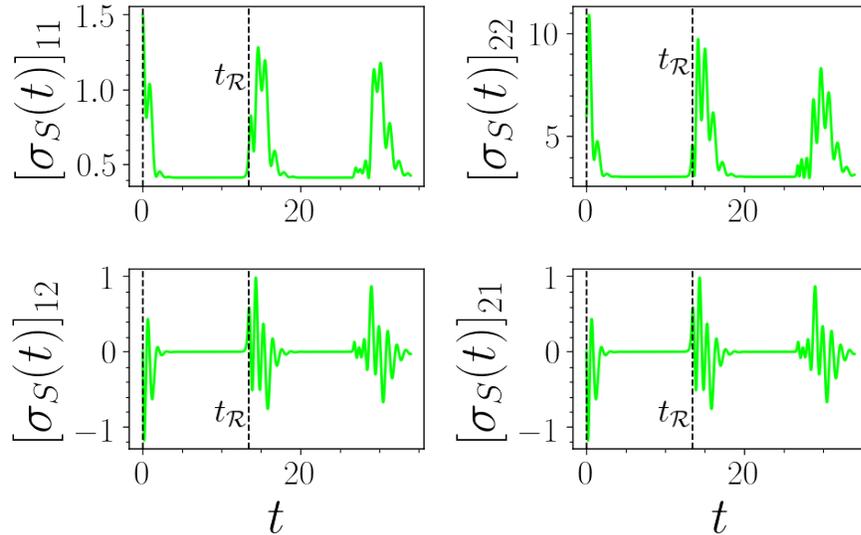


Figura 3.3: Entradas de la MC $\sigma_S(t)$ (3.98) en función del tiempo según la evolución simpléctica (3.94) con una muestra homogénea de frecuencias. Se considera como condición inicial la MC $\sigma_S(0)$ del oscilador central asociada al primer estado excitado $\hat{\rho}_S(0) = |1\rangle\langle 1|$ y se escogen los parámetros $\gamma = 1$, $N = 150$, $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$, $\beta = 10$, $m_0 = 1$, $m_k = 1 \forall k$, $\omega_{\text{máx}} = 70$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's.

[99]; que en el caso discreto (lejos del límite termodinámico) no corresponde a la vez a un fenómeno estacionario. Si el equilibrio ocurre a una escala temporal $t_{\text{eq}} > t_{\mathcal{R}}$, para aumentar $t_{\mathcal{R}}$ sería necesario aumentar el costo de cómputo como consecuencia del aumento de N . t_{eq} aumenta conforme disminuye γ y en consecuencia disminuyen las constantes g_k .

3.4.1.2. Muestra Lorentziana de frecuencias

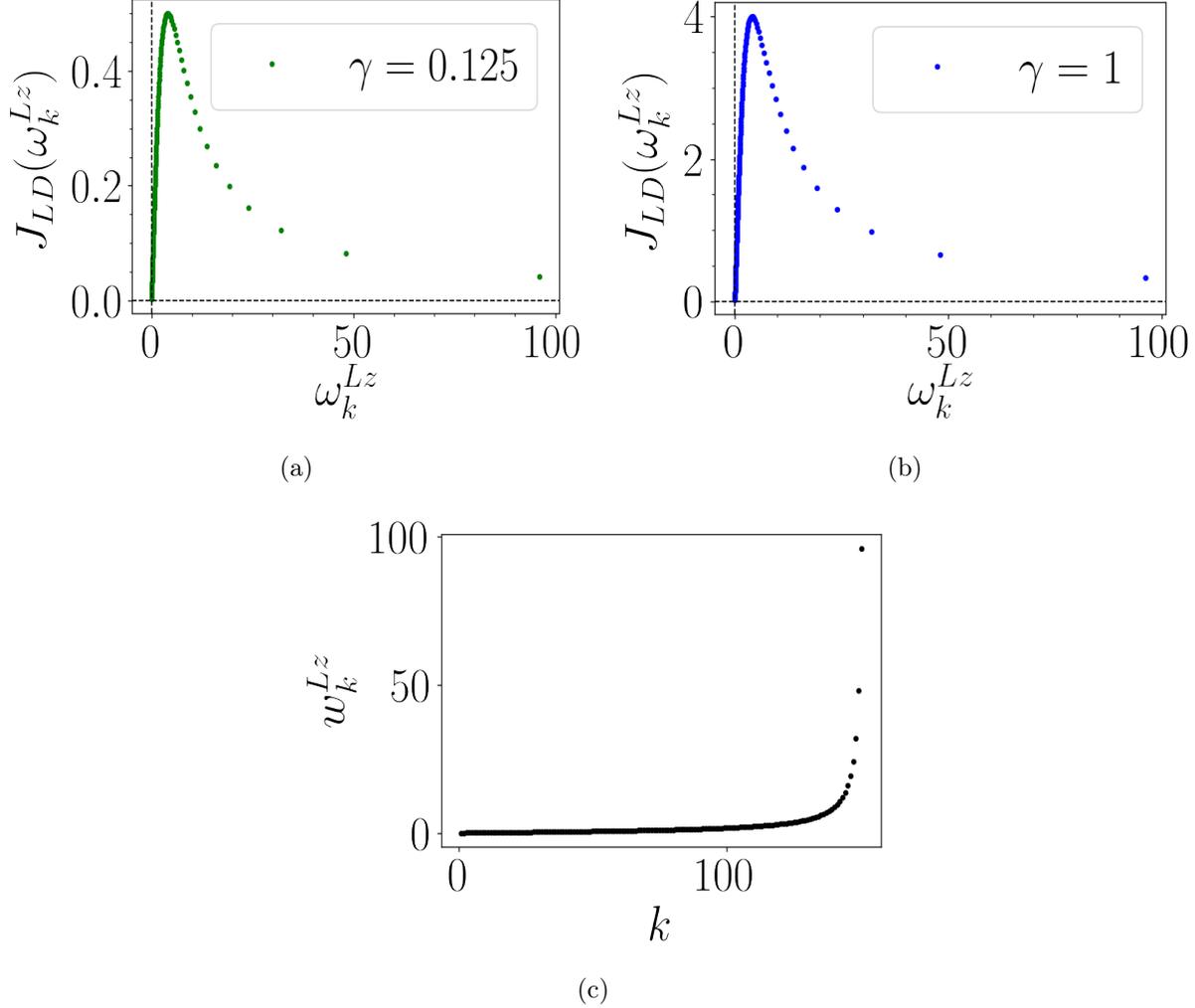


Figura 3.4: Densidad espectral con regularización de Lorentz-Drude en función de una muestra Lorentziana de frecuencias donde $N = 150$, $m_0 = 1$, $m_k = 1 \forall k$, $\omega_D = 4$, $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$, (a) $\gamma = 0.125$ y (b) $\gamma = 1$. (c) Muestra Lorentziana de frecuencias usada para las figuras (a) y (b).

Las frecuencias en este tipo de muestra se expresan por [92]

$$\omega_k^{Lz} = a_0 \tan \left[\frac{\pi}{2} \frac{k}{N+1} \right], \quad (3.104)$$

donde a_0 es un parámetro ajustable que determina el ancho de la muestra Lorentziana. La diferencia entre frecuencias se define por $\Delta_{k \neq 1} \equiv \omega_k - \omega_{k-1}$ para $k = 2, \dots, N$ y $\Delta_1 = \omega_1$.

La muestra (3.104) posee una alta densidad de frecuencias entorno a $\omega = 0$ y conforme k aumenta, la densidad disminuye [Figura 3.4]. En este caso, el tiempo de las recurrencias de Poincaré está fuertemente determinado por el valor de γ : mientras mayor es el valor de γ , las recurrencias de Poincaré aparecen a un tiempo menor. Esto tiene por ventaja, en contraste con la muestra homogénea de frecuencias, que permite estudiar efectos de equilibración para un rango de valores de γ en que el tiempo $t_{\mathcal{R}}$ (de la muestra homogénea) es menor que el tiempo de equilibración, no obstante, fuera de este rango, el tiempo de las recurrencias de Poincaré de la muestra Lorentziana es menor que $t_{\mathcal{R}}$, pudiendo ser incluso menor que t_{eq} ; siendo este el caso, es conveniente ocupar la muestra homogénea para estudiar el equilibrio. Ocupando la regularización de Lorentz-Drude, las constantes de acoplamiento para la muestra Lorentziana quedan

$$g_k^{Lz} \approx \sqrt{\frac{4\gamma m_0 m_k \omega_k^2 \Delta_k}{\pi [1 + (\omega_k/\omega_D)^2]}}, \quad (3.105)$$

donde se considera igualmente válida la aproximación entre (3.100) y (3.101) con una vecindad entorno a cada ω_k definida por Δ_k , pues por el comportamiento asintótico de $J_{LD}(\omega)$, en primer lugar, mientras mayor sean las frecuencias, la derivada de $J_{LD}(\omega)$ disminuye, siendo entonces el primer orden en la expansión de Taylor una buena aproximación para $J_{LD}(\omega)$ entorno a ω_k y, en segundo lugar, en la medida que aumenta k , los osciladores del baño contribuyen menos a la dinámica del oscilador central. Tanto a_0 como Δ_N se pueden ajustar para conseguir que la evolución simpléctica para cierto valor de N sea una buena representación de la evolución en el límite continuo y con ello reproducir las convergencias asintóticas en el equilibrio donde se cumple que $\sigma_S(+\infty) = \sigma_{\omega_{\text{FM}}}$ tanto para condiciones iniciales Gaussianas y no Gaussianas del oscilador central. En la Figura 3.5 se escoge una condición inicial no Gaussiana para el oscilador central y la regularización de Lorentz-Drude para comparar la evolución (no unitaria) de la MC del estado reducido del oscilador central en el límite continuo (ecuación de Langevin) con la evolución de la MC del oscilador central contenida en la evolución simpléctica $\sigma_{\text{CL}}(t)$. Se observa una dinámica concordante –sujeta a la elección de los parámetros– tanto en la frecuencia de las oscilaciones, en la tasa de decaimiento producto de la dinámica disipativa y en las convergencias en el equilibrio, las cuales están expresadas de manera general (salvo un factor 2) por las soluciones (3.44). En la Figura 3.6 se reproducen las convergencias asintóticas del límite continuo a partir de la evolución simpléctica de $\sigma_{\text{CL}}(t)$ con condiciones iniciales Gaussianas. En la Figura 3.7 se reproducen las convergencias asintóticas del límite continuo y alta temperatura [ver (3.45) y (3.47)] y en la Figura 3.8 se reproducen las convergencias asintóticas del límite continuo y acoplamiento débil [ver (3.68)]; donde se cumple que $\hat{\rho}_S(+\infty) \rightarrow \exp(-\beta \hat{H}_S) / \text{Tr}_S[\exp(-\beta \hat{H}_S)]$ cuando $\gamma \rightarrow 0$.

3.5. Aspectos relevantes del capítulo

A modo de resumen, vale la pena destacar los siguientes aspectos del presente capítulo que serán de utilidad en el último capítulo:

- El Hamiltoniano de Caldeira-Leggett es un Hamiltoniano cuadrático acotado inferiormente. Este describe a un oscilador armónico que se acopla linealmente a un baño compuesto por un conjunto de osciladores armónicos.

$$\gamma = 1.0$$

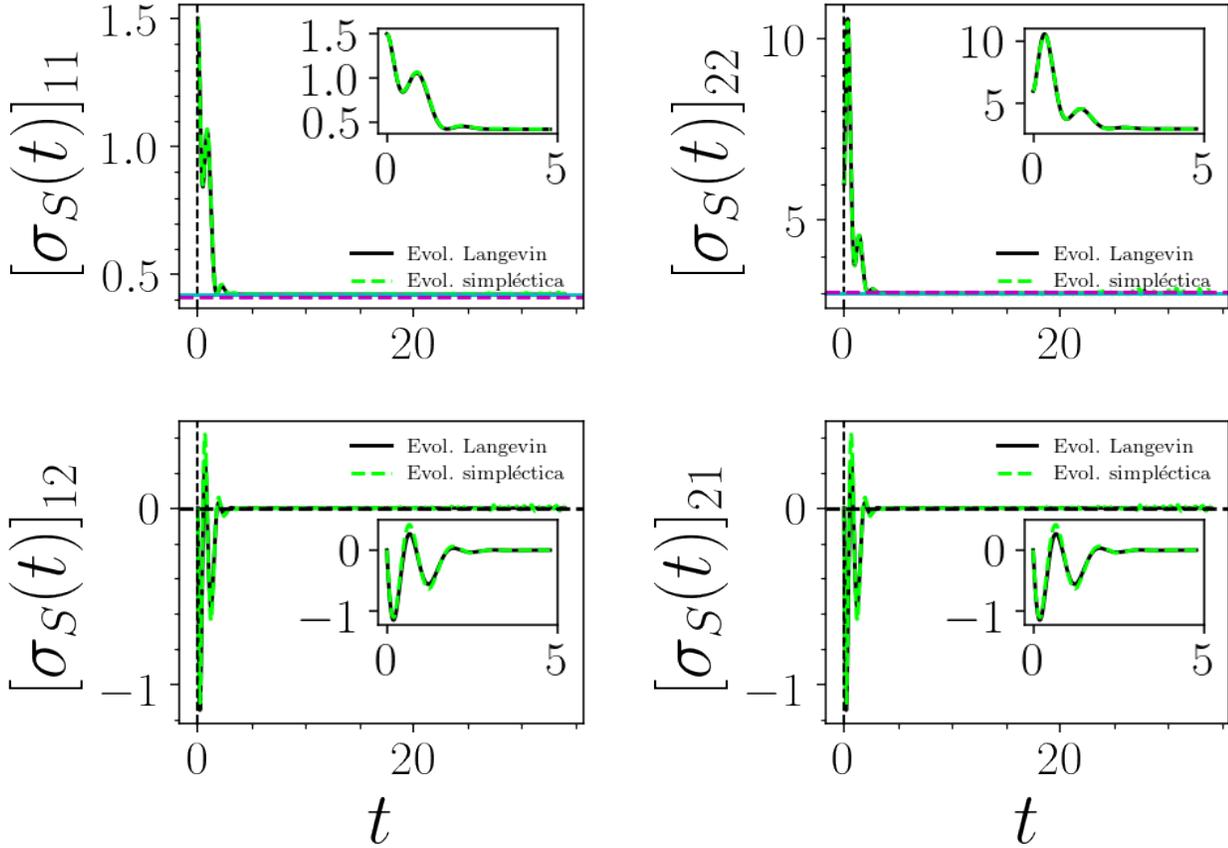


Figura 3.5: Entradas de la MC $\sigma_S(t)$ en función del tiempo. Se considera como condición inicial la MC $\sigma_S(0)$ del oscilador central asociada al primer estado excitado $\hat{\rho}_S(0) = |1\rangle\langle 1|$. Las curvas segmentadas verdes corresponden a las entradas de la MC del oscilador central (3.98) según la evolución simpléctica (3.94) con una muestra Lorentziana de frecuencias. Las curvas continuas negras corresponden a la evolución dada por las soluciones de la ecuación de Langevin (límite continuo). Las curvas continuas de color cian corresponde al valor de las entradas diagonales de la MC $\sigma_S(+\infty)$ asociada al estado estacionario del oscilador central en el límite continuo [ver (3.44)]. Las curvas segmentadas de color magenta corresponden al valor de las entradas diagonales de la MC $\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}$ asociada al estado Gibbsiano de fuerza media, $\hat{\omega}_{\text{FM}}$, cuando el baño es finito. Se escogen los parámetros $\gamma = 1$, $N = 150$, $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$, $\beta = 10$, $m_0 = 1$, $m_k = 1 \forall k$, $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's.

$$\gamma = 1.0$$

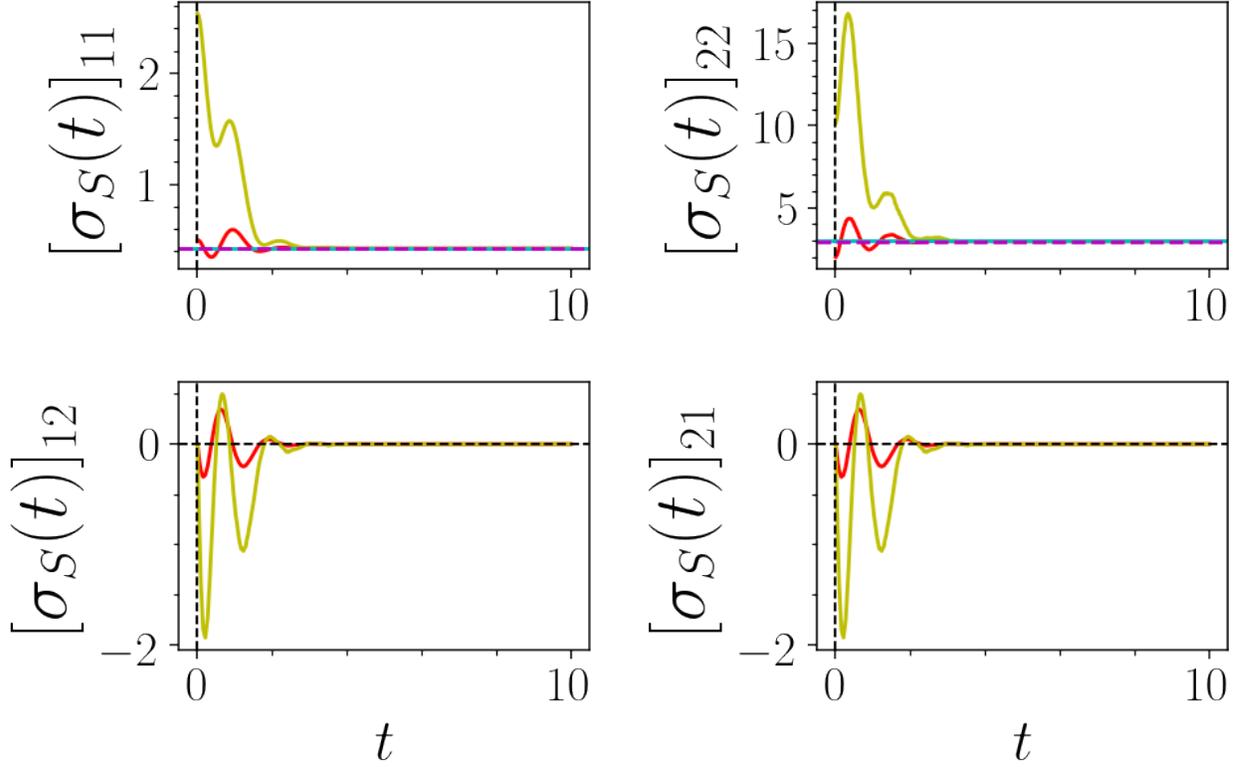


Figura 3.6: Entradas de la MC $\sigma_S(t)$ (3.98) en función del tiempo según la evolución simpléctica (3.94) con una muestra Lorentziana de frecuencias. Se consideran como condiciones iniciales la MC del oscilador central asociada al estado basal Gaussiano $\hat{\rho}_S(0) = |0\rangle\langle 0|$ (curvas rojas) y la MC asociada al estado térmico Gaussiano $\hat{\rho}_S(0) = \exp(-\beta_S \hat{H}_S) / \text{Tr}_S[\exp(-\beta_S \hat{H}_S)]$ con $\beta_S = 0.2$ (curvas amarillas). Las rectas continuas de color cian corresponden al valor de las entradas diagonales de la MC $\sigma_S(+\infty)$ asociada al estado estacionario del oscilador central en el límite continuo [Figura 3.5]. Las rectas segmentadas de color magenta corresponden al valor de las entradas diagonales de la MC $\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}$ asociada al estado Gibbsiano de fuerza media, $\hat{\omega}_{\text{FM}}$, cuando el baño es finito [Figura 3.5]. Se escogen los parámetros $\gamma = 1$, $N = 150$, $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$, $\beta = 10$, $m_0 = 1$, $m_k = 1 \forall k$, $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's.

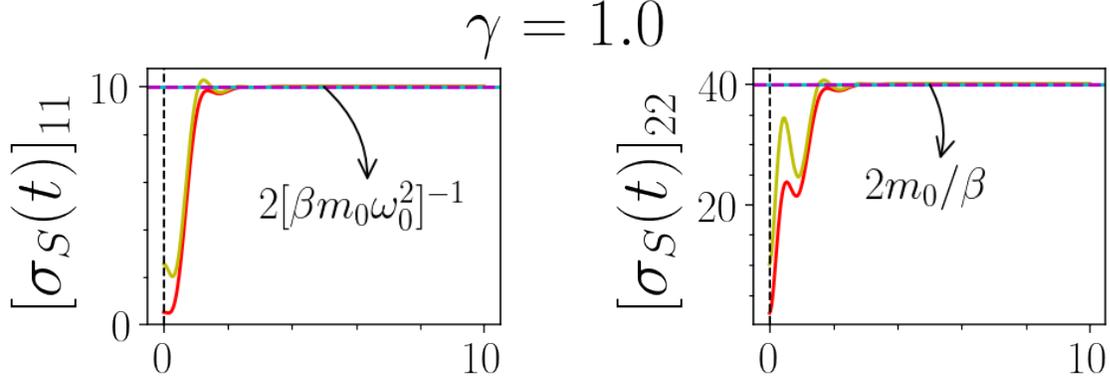


Figura 3.7: Entradas diagonales de la MC $\sigma_S(t)$ (3.98) en función del tiempo según la evolución simpléctica (3.94) con una muestra Lorentziana de frecuencias. Se consideran como condiciones iniciales la MC del oscilador central asociada al estado basal Gaussiano $\hat{\rho}_S(0) = |0\rangle\langle 0|$ (curvas rojas) y la MC asociada al estado térmico Gaussiano $\hat{\rho}_S(0) = \exp(-\beta_S \hat{H}_S) / \text{Tr}_S[\exp(-\beta_S \hat{H}_S)]$ con $\beta_S = 0.2$ (curvas amarillas). Las rectas continuas de color cian corresponden al valor de las entradas diagonales de la MC $\sigma_S(+\infty)$ asociada al estado estacionario del oscilador central en el límite continuo y de alta temperatura [ver (3.45) y (3.47)]. Las rectas segmentadas de color magenta corresponden al valor de las entradas diagonales de la MC $\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}$ asociada al estado Gibbsiano de fuerza media, $\hat{\omega}_{\text{FM}}$, cuando el baño es finito. Se escogen los parámetros $\gamma = 1$, $N = 150$, $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$, $\beta = 0.05$ (“alta temperatura”), $m_0 = 1$, $m_k = 1 \forall k$, $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's.

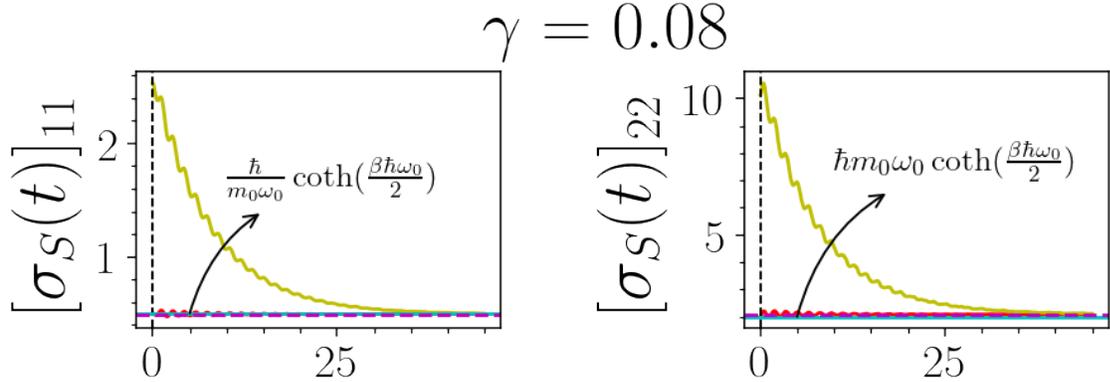


Figura 3.8: Entradas diagonales de la MC $\sigma_S(t)$ (3.98) en función del tiempo según la evolución simpléctica (3.94) con una muestra Lorentziana de frecuencias. Se consideran como condiciones iniciales la MC del oscilador central asociada al estado basal Gaussiano $\hat{\rho}_S(0) = |0\rangle\langle 0|$ (curvas rojas) y la MC asociada al estado térmico Gaussiano $\hat{\rho}_S(0) = \exp(-\beta_S \hat{H}_S) / \text{Tr}_S[\exp(-\beta_S \hat{H}_S)]$ con $\beta_S = 0.2$ (curvas amarillas). Las rectas continuas de color cian corresponden al valor de las entradas diagonales de la MC $\sigma_S(+\infty)$ asociada al estado estacionario del oscilador central en el límite continuo y acoplamiento débil (3.68). Las rectas segmentadas de color magenta corresponden al valor de las entradas diagonales de la MC $\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}$ asociada al estado Gibbsiano de fuerza media, $\hat{\omega}_{\text{FM}}$, cuando el baño es finito. Se escogen los parámetros $\gamma = 0.08$ (“acoplamiento débil”), $N = 150$, $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$, $\beta = 10$, $m_0 = 1$, $m_k = 1 \forall k$, $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's.

- La evolución temporal generada por el Hamiltoniano de Caldeira-Leggett es una evolución unitaria Gaussiana.
- La ecuación de Langevin describe un proceso disipativo de un sistema cuántico abierto que interactúa con un baño térmico. Del baño depende que la dinámica presente memoria y que el ruido sea colorido. El sistema estará sometido a fluctuaciones cuánticas que serán de gran relevancia cuando la temperatura del baño térmico sea cada vez menor.
- El estado estacionario del oscilador central producto de la dinámica descrita por la ecuación de Langevin es un estado Gaussiano. Este estado es igual al estado Gibbsiano de fuerza media.
- Veremos en el siguiente capítulo que el estado de fuerza media corresponde a un estado cargado de la batería si el acoplamiento entre el oscilador central y el baño es fuerte.
- La regularización de Lorentz-Drude provee una forma realista de modelar un baño.
- Es posible reproducir la dinámica en el límite termodinámico del oscilador central por medio de la evolución simpléctica del sistema compuesto en los distintos regímenes de acoplamiento y temperatura. En especial, se reproducen las convergencias en el equilibrio en el límite termodinámico por medio del formalismo simpléctico y un baño finito.
- Corroboramos numéricamente el resultado $\hat{\rho}_S(+\infty) = \hat{\omega}_{\text{FM}}$.
- La dinámica con un baño finito agrega otra escala temporal relevante: el tiempo de las recurrencias de Poincaré.
- El formalismo simpléctico, aparte de posibilitar el tratamiento de la evolución del sistema compuesto por medio de cantidades finitas, también permite tener acceso al estado del sistema de interés y al estado del baño en cada instante de tiempo, esto, en contraste con el formalismo de la ecuación de Langevin en el cual se eliminan los grados de libertad del baño y solo se obtiene información sobre el sistema de interés.
- La dinámica del oscilador central descrita por la ecuación de Langevin o por la evolución simpléctica corresponde al proceso de carga de la batería cuántica mencionado en el Capítulo 2.

Capítulo 4

Ciclos de carga y descarga aplicados al modelo CL con baño finito

Motivados por el trabajo desarrollado en Hovhannisyan et al. [12], el resultado (3.91),

$$\hat{\omega}_{\text{FM}} = \hat{\rho}_{\text{S}}(+\infty), \quad (4.1)$$

y la posibilidad de reproducir el límite continuo a través de la evolución simpléctica, implementamos un ciclo termodinámico de carga de una batería cuántica cuyo rol es jugado por el oscilador central del modelo CL y donde el agente de carga es el baño discreto con una cantidad finita de osciladores armónicos. La naturaleza Gaussiana de los estados que conforman el ciclo permite describir su energética y figuras de mérito por medio del formalismo simpléctico descrito en el Capítulo 1 y las expresiones termodinámicas presentadas en el Capítulo 2.

En el ciclo, inicialmente el sistema compuesto se prepara en el estado térmico Gaussiano

$$\hat{\tau}_{\text{tot}} = \frac{\exp(-\beta \hat{H}_{\text{CL}})}{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}_{\text{CL}})]} \quad (4.2)$$

procurando que el acoplamiento entre la batería y el baño sea lo suficientemente fuerte para que la batería se encuentre en su estado Gibbsiano de fuerza media cargado con ergotropía \mathcal{W} . Como $\hat{\tau}_{\text{tot}}$ es un estado Gaussiano con primeros momentos nulos, computacionalmente calculamos su MC, $\sigma_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}$, a partir de su forma normal de Williamson,

$$\sigma_{\beta} = \bigoplus_{j=0}^N \begin{bmatrix} \coth\left(\frac{\beta \hbar \tilde{\omega}_j}{2}\right) & 0 \\ 0 & \coth\left(\frac{\beta \hbar \tilde{\omega}_j}{2}\right) \end{bmatrix}, \quad (4.3)$$

donde determinamos las frecuencias de los modos normales, $\{\tilde{\omega}_j\}_{j \geq 0}$, por medio de la diagonalización simpléctica de la matriz Hamiltoniana asociada a \hat{H}_{CL} y luego transformamos σ_{β} a la base física por medio del cálculo de la matriz simpléctica $\mathbf{S}_{\mathbf{H}}$. La MC inicial de la batería se expresa entonces por la matriz simétrica

$$\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}} = \begin{pmatrix} [\sigma_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}]_{11} & 0 \\ 0 & [\sigma_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}]_{22} \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

En la primera rama del ciclo se activa un protocolo de desconexión mediado por un parámetro adimensional dependiente del tiempo, $\lambda(t)$, que para cierto tiempo de desconexión, t_d , se anula. $\lambda(t)$ actúa solo sobre el término de interacción del modelo CL: $\lambda(t)^2 m_0 \omega_R^2 \hat{Q}_0^2 / 2 - \lambda(t) \hat{Q}_0 \sum_k g_k \hat{Q}_k$ (con $k = 1, \dots, N$). Se consideran dos escenarios para el comportamiento de $\lambda(t)$: 1) pasar de $\lambda(0) = 1$ a $\lambda(t_d) = 0$ de manera instantánea ($t_d = 0^+$), lo cual es conocido como un *protocolo quench instantáneo* (que se detalla más abajo en el texto), y 2) pasar de $\lambda(0) = 1$ a $\lambda(t_d) = 0$ con $\lambda(t)$ una función continua en $[0, t_d]$ y t_d finito. Luego de la desconexión entre la batería y el baño, en la segunda rama del ciclo accedemos al estado de la batería, y estando esta cargada, extraemos instantáneamente \mathcal{W} , quedando luego la batería en el estado pasivo Gaussiano $\hat{\rho}_S^p(t_d)$ caracterizado por la MC

$$\sigma_{\hat{\rho}_S^p(t_d)} = \sqrt{[\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}(t_d)]_{11}[\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}(t_d)]_{11} - [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}(t_d)]_{12}^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{m_0 \omega_0} & 0 \\ 0 & m_0 \omega_0 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

obtenida tras la aplicación (por congruencia) de la matriz simpléctica de dimensión 2×2 $\mathbf{S}_{\hat{U}_G}$ [ver (2.6)] sobre $\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}(t_d)}$. Tras la extracción, en la tercera rama del ciclo, la batería se conecta vía un protocolo quench instantáneo a un nuevo baño en su estado térmico, $\hat{\tau}_B \equiv \exp(-\beta \hat{H}_B) / \text{Tr}_B[\exp(-\beta \hat{H}_B)]$, y luego esta es nuevamente cargada en la cuarta rama del ciclo producto del encendido de la interacción, donde al sistema compuesto se lo deja evolucionar según la evolución (3.61) alcanzando al final de proceso de carga el estado

$$\hat{\Omega}_{\text{eq}} = \lim_{t \rightarrow t_{\text{eq}}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{\text{CL}} t\right) \hat{\rho}_S^p(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{\text{CL}} t\right), \quad (4.6)$$

siendo el estado reducido de la batería $\text{Tr}_B[\hat{\Omega}_{\text{eq}}] = \hat{\omega}_{\text{FM}}$, el cual está caracterizado por la MC $\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}$. Al estado final del sistema compuesto en el proceso de carga, $\hat{\Omega}_{\text{eq}}$, lo etiquetamos con la etiqueta “eq” para hacer incapié en que en el caso discreto el estado cargado de la batería, $\text{Tr}_B[\hat{\Omega}_{\text{eq}}]$ (con el que se cierra el ciclo), no es un estado estacionario, pero que en la medida que nos aproximamos al límite termodinámico $\text{Tr}_B[\hat{\Omega}_{\text{eq}}] \rightarrow \hat{\rho}_S(+\infty)$ con MC $\sigma_S(+\infty)$ [ver (3.63)], pues el tiempo de las recurrencias de Poincaré tiende a infinito. Como condición inicial del proceso de carga tomamos el estado descorrelacionado entre el estado pasivo de la batería y el estado térmico del baño, pues se considera la situación ideal en que la interacción es encendida de manera instantánea, es decir, el estado del sistema compuesto permanece “congelado” debido a que la evolución para el proceso de conexión es igual al operador identidad, pero a los Hamiltonianos libres de la batería y el baño se les suma el término de interacción. A este tipo de protocolo se le llama protocolo quench instantáneo [100, 99, 101, 12, 102]:

$$\begin{array}{c} \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_B \xrightarrow{\text{quench}} \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_B \\ \text{y} \\ \hat{H}_S + \hat{H}_B \xrightarrow{\text{quench}} \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_I. \end{array} \quad (4.7)$$

Para describir el comportamiento del baño se escoge la muestra Lorentziana o la muestra homogénea de frecuencias (o ambas) dependiendo de la elección de los demás parámetros del Hamiltoniano que determinan la ocurrencia de las recurrencias de Poincaré en el proceso de

carga. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude en la generación de los acoplamientos g_k 's. Es importante hacer notar que en el caso discreto (lejos del límite termodinámico) la elección de los parámetros de la batería y el baño incide en la posibilidad de cerrar el ciclo de la batería, es decir, que se cumpla la igualdad $\text{Tr}_B[\hat{\Omega}_{\text{eq}}] = \hat{\omega}_{\text{FM}}$. En especial observamos que para valores donde $\omega_0 \rightarrow 0$ (límite de partícula libre) el estado $\text{Tr}_B[\hat{\Omega}_{\text{eq}}]$ no converge al estado de fuerza media.

4.1. Ciclo con protocolos de conexión y desconexión tipo quench

Preparado inicialmente el estado (4.2), se aplica el protocolo quench instantáneo para la desconexión batería-baño. El estado de la batería luego del quench es $\hat{\omega}_{\text{FM}}$ con MC $\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}$. Para el proceso de conexión, como ya mencionamos, también se aplica un protocolo quench. A continuación se detallan la energética del ciclo y su desempeño.

4.1.1. Ergotropía

En este caso, la ergotropía (Gaussiana) [ver (2.5)] del estado cargado de la batería se expresa por

$$\mathcal{W}^{\text{quench}} = \frac{1}{4} \left(m_0 \omega_0^2 [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11} + \frac{[\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22}}{m_0} \right) - \frac{\omega_0}{2} \sqrt{[\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11} [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22}}, \quad (4.8)$$

donde $\omega_0/2$ es el único autovalor simpléctico de la matriz Hamiltoniana

$$\mathbf{H}_S = \begin{pmatrix} \frac{m_0 \omega_0^2}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2m_0} \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

asociada al Hamiltoniano \hat{H}_S de la batería libre y $\sqrt{[\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11} [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22}}$ es el único autovalor simpléctico de la MC $\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}$ [ver (4.4)]. La matriz simpléctica $\mathbf{S}_{\hat{U}_G}$ [ver (2.6)], asociada al operador unitario que extrae la ergotropía desde la batería, es

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\hat{U}_G} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{m_0 \omega_0} & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{m_0 \omega_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{([\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11})^{1/2}}{([\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11} [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22})^{1/4}} & 0 \\ 0 & \frac{([\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22})^{1/2}}{([\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11} [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22})^{1/4}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(\frac{([\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22})}{m_0 \omega_0} \right)^{1/2} & \frac{1}{([\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11} [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22})^{1/4}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(m_0 \omega_0 [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11})^{1/2}}{([\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{11} [\sigma_{\hat{\omega}_{\text{FM}}}]_{22})^{1/4}} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

En la Figura 4.1 se grafica el comportamiento de $\mathcal{W}^{\text{quench}}$ en función de: (a) la tasa de disipación (o fuerza del acoplamiento) γ ; (b) la frecuencia de corte ω_D ; (c) la temperatura β^{-1}

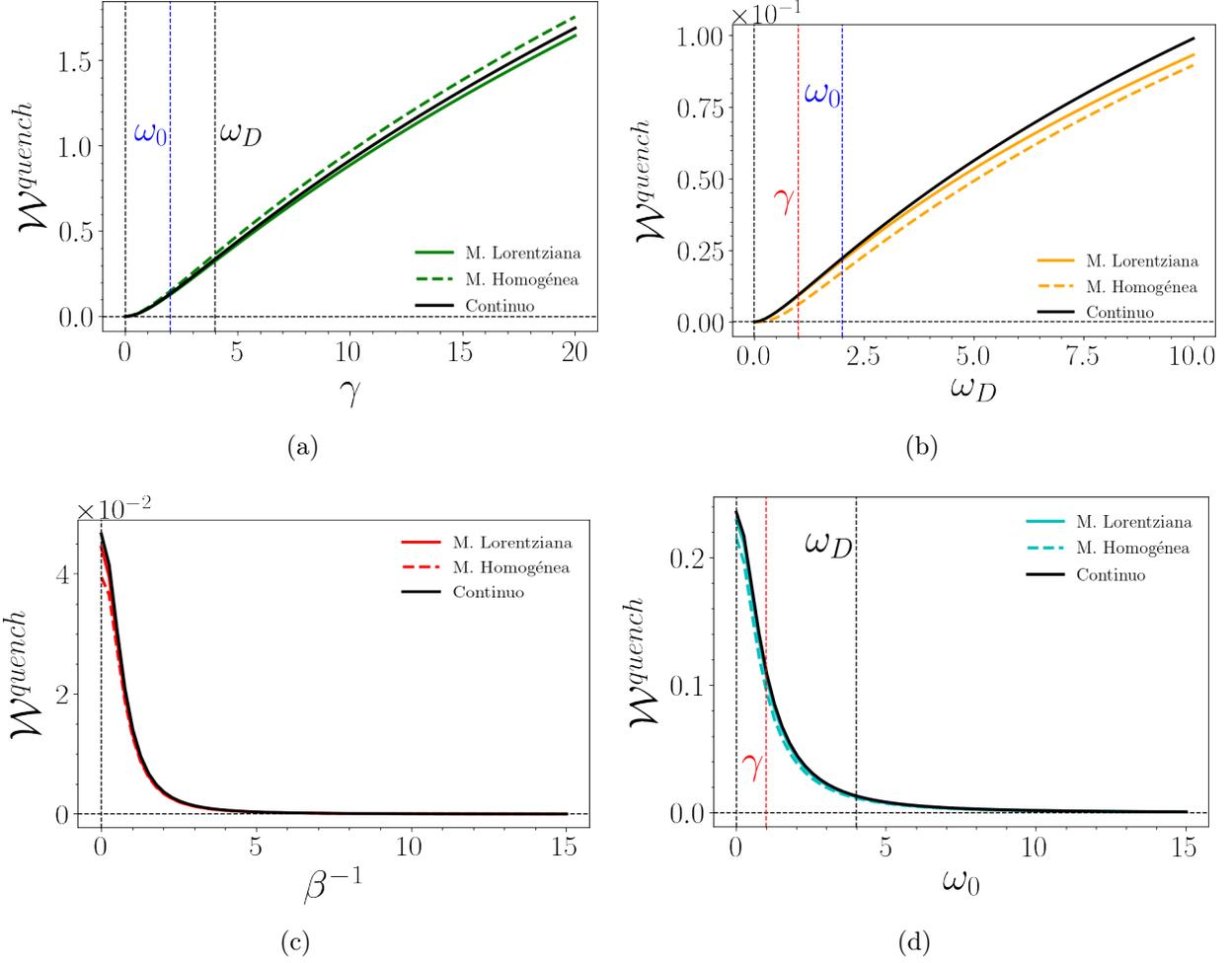


Figura 4.1: Ergotropía para los casos continuo y discretos en función de: (a) la fuerza del acoplamiento, (b) la frecuencia de corte, (c) la temperatura y (d) la frecuencia libre del oscilador central. Para los tres casos se escoge $m_0 = 1$, la regularización de Lorentz-Drude y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Para ambos casos discretos se escoge $m_k = 1 \forall k$ y $N = 150$, pero, en particular, para el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y para el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias se escoge $\omega_{\text{máx}} = 70$. Para los tres casos se escogen los siguientes parámetros : (a) $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\omega_D = 4$; (b) $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\gamma = 1$; (c) $\omega_0 = 2$, $\gamma = 1$ y $\omega_D = 4$ y (d) $\gamma = 1$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\omega_D = 4$.

y (d) la frecuencia libre de la batería ω_0 . En los casos discretos; donde tomamos una muestra Lorentziana y una muestra homogénea de frecuencias para modelar al baño y al estado térmico inicial $\hat{\tau}_{\text{tot}}$, en primer lugar, se desprende que la ergotropía de la batería aumenta en la medida que aumentan los acoplamientos g_k 's (determinados por γ) entre la batería y los osciladores del baño, dicho de otra manera, mientras el régimen de acoplamiento sea fuerte, la batería inicialmente estará cargada y su carga aumentará con el aumento de γ . En segundo lugar, mientras el comportamiento del baño tienda a ser puramente óhmico ($\omega_D \rightarrow +\infty$), la carga inicial de la batería será mayor. Finalmente, el estado de la batería tendrá menos ergotropía si se tiende a un límite clásico con el aumento de la temperatura ($\beta \rightarrow 0$) o la escala temporal definida por ω_0 tiende a ser mucho menor que la escala temporal definida por γ (régimen

de acoplamiento débil). Debido a que los g_k 's dependen explícitamente de los parámetros γ y ω_D , se observa una discrepancia entre las ergotropías de los casos continuo y discretos que aumenta en la medida que aumentan γ y ω_D , esto se explica porque las aproximaciones usadas para generar las constantes de acoplamiento son válidas cuando: 1) las diferencias entre frecuencias entorno al pico de la densidad espectral con regularización de Lorentz-Drude son pequeñas y 2) en el comportamiento asintótico (cola) de la densidad espectral, $J_{LD}(\omega_k)$ acepta como buena aproximación una expansión en serie a primer orden; ambas condiciones se pierden con el aumento de γ y ω_D a N fijo. Recordar que cuando $\omega_D \rightarrow +\infty$, $J_{LD}(\omega)$ tiende a una densidad espectral estrictamente lineal. El caso discreto con muestra Lorentziana se ajusta mejor que el caso discreto con muestra homogénea a los resultados del caso continuo. En el caso continuo, al igual que en los casos discretos, la ergotropía presenta un crecimiento monótono en función de γ y ω_D y un decrecimiento monótono (convergente a cero) en función de β^{-1} y ω_0 . En los tres casos la ergotropía es nula cuando la interacción es nula, lo cual ocurre cuando $\gamma = 0$ o cuando $\omega_D = 0$ [ver (3.51)].

4.1.2. Trabajos

4.1.2.1. Trabajo de desconexión

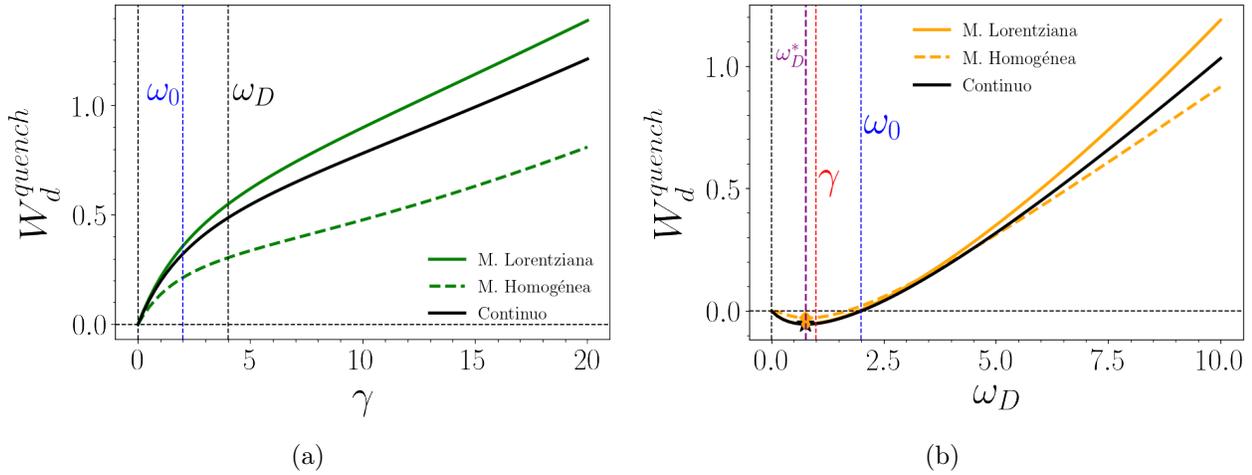


Figura 4.2: Trabajo de desconexión para los casos continuo y discretos en función de: (a) la fuerza del acoplamiento y (b) la frecuencia de corte. Para los tres casos se escoge $m_0 = 1$, la regularización de Lorentz-Drude, unidades tales que $\hbar = k_B = 1$, en el panel (a): $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\omega_D = 4$, y en el panel (b): $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\gamma = 1$. Para ambos casos discretos se escoge $m_k = 1 \forall k$ y $N = 150$, pero, en particular, para el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y para el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias se escoge $\omega_{\text{máx}} = 70$. Para todos los casos se escogen los siguientes parámetros : (a) $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\omega_D = 4$ y (b) $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\gamma = 1$.

El trabajo de desconexión en el quench se expresa por [ver (2.16)]

$$\begin{aligned}
W_d^{quench} &= -\text{Tr} \left[\left(\frac{m_0 \omega_R^2}{2} \hat{Q}_0^2 - \hat{Q}_0 \sum_{k=1}^N g_k \hat{Q}_k \right) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&= \frac{m_0}{2} \left(\omega_0^2 + \frac{\omega_R^2}{2} \right) [\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{11} - \frac{[\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{22}}{2m_0},
\end{aligned} \tag{4.11}$$

donde para obtener la segunda igualdad se hace uso de $[\hat{U}_{\text{CL}}(t), \hat{\tau}_{\text{tot}}] = 0$ [ver (3.62)], la propiedad cíclica de la traza y las ecuaciones de Heisenberg (3.16) y (3.17), pues se tiene que

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left[\hat{Q}_0(0) \sum_k g_k \hat{Q}_k(0) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] &= \text{Tr} \left[\hat{Q}_0(t) \sum_k g_k \hat{Q}_k(t) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&= \text{Tr} \left[\hat{Q}_0(t) m_0 \left(\frac{d^2 \hat{Q}(t)}{dt^2} + [\omega_0^2 + \omega_R^2] \hat{Q}_0(t) \right) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&= \text{Tr} \left[\hat{Q}_0(t) \frac{d\hat{P}_0(t)}{dt} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] + m_0 (\omega_0^2 + \omega_R^2) \text{Tr} \left[\hat{Q}_0^2(0) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&= \frac{m_0}{2} (\omega_0^2 + \omega_R^2) [\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{11} - \frac{[\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{22}}{2m_0};
\end{aligned} \tag{4.12}$$

con $\hat{Q}_0(0) \equiv \hat{Q}_0$, $\hat{Q}_k(0) \equiv \hat{Q}_k$,

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left[\frac{d}{dt} \left(\hat{Q}_0(t) \hat{P}_0(t) \right) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] &= \frac{d}{dt} \text{Tr} \left[\hat{Q}_0(0) \hat{P}_0(0) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left[\frac{d}{dt} \left(\hat{Q}_0(t) \hat{P}_0(t) \right) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] &= \frac{1}{m_0} \text{Tr} \left[\hat{P}_0^2(t) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] + \text{Tr} \left[\hat{Q}_0(t) \frac{d\hat{P}_0(t)}{dt} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&= \frac{1}{m_0} \text{Tr} \left[\hat{P}_0^2(0) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] + \text{Tr} \left[\hat{Q}_0(t) \frac{d\hat{P}_0(t)}{dt} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&= \frac{[\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{22}}{2m_0} + \text{Tr} \left[\hat{Q}_0(t) \frac{d\hat{P}_0(t)}{dt} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right].
\end{aligned}$$

La expresión (4.11) para el trabajo W_d^{quench} es independiente de la cantidad de osciladores del baño.

De la Figura 4.2; donde se consideran los casos continuo y discretos (Lorentziano y homogéneo), se desprende que W_d^{quench} aumenta cuando aumenta el acoplamiento y cuando el comportamiento del baño tiende a ser estrictamente óhmico. Para valores de γ y ω_D nulos, el trabajo de desconexión también es nulo, debido a que en ambos casos no existe interacción entre el oscilador central y el baño. En función de γ , W_d^{quench} se comporta como una función estrictamente creciente. Entorno al régimen de acoplamiento débil existe concordancia mayor entre el caso continuo y el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias que entre el

caso continuo y el caso discreto con muestra homogénea, no obstante, ambos casos discretos discrepan cada vez más del continuo cuando el acoplamiento es cada vez mayor. En función de ω_D , W_d^{quench} en los tres casos presenta un mínimo negativo en $\omega_D = \omega_D^*$, un cambio de signo cercano a $\omega_D = \omega_0$ y luego un crecimiento estricto desde donde la diferencia entre los casos discretos y continuo se acrecienta en la medida que aumenta el valor de la frecuencia de corte. El cambio de signo para W_d^{quench} indica que para valores de ω_D menores a la frecuencia libre del oscilador, el proceso de desconexión conlleva extracción de trabajo con un trabajo máximo a extraer (mínimo de la curva), y para valores de ω_D donde $W_d^{quench} > 0$ el proceso de desconexión conlleva hacer trabajo sobre el sistema compuesto, implicando un costo en energía para llevar a cabo el proceso.

4.1.2.2. Trabajo de conexión

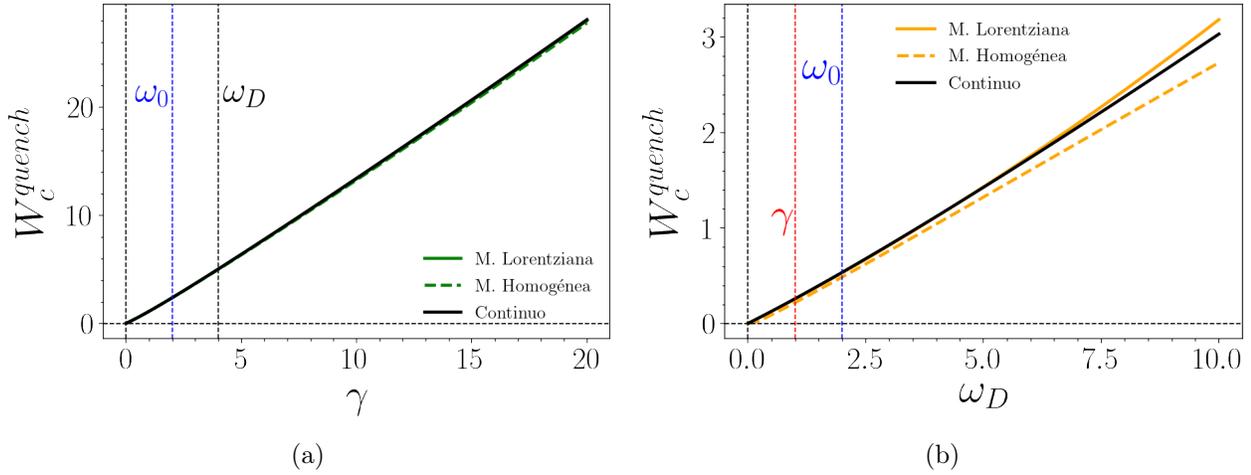


Figura 4.3: Trabajo de conexión para los casos continuo y discretos en función de: (a) la fuerza del acoplamiento y (b) la frecuencia de corte. Para los tres casos se escoge $m_0 = 1$, la regularización de Lorentz-Drude, unidades tales que $\hbar = k_B = 1$, en el panel (a): $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\omega_D = 4$, y en el panel (b): $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\gamma = 1$. Para ambos casos discretos se escoge $m_k = 1 \forall k$ y $N = 150$, pero, en particular, para el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y para el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias se escoge $\omega_{\text{máx}} = 70$. Para todos los casos se escogen los siguientes parámetros : (a) $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\omega_D = 4$ y (b) $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\gamma = 1$.

Para el protocolo de conexión, el costo en trabajo del quench –en principio– se expresa solo en términos del Hamiltoniano de interacción y el estado producto entre el estado descargado

de la batería y el estado térmico del baño [ver (2.16)], es decir,

$$\begin{aligned}
W_c^{quench} &= \text{Tr} \left[\left(\frac{m_0 \omega_R^2}{2} \hat{Q}_0^2 - \hat{Q}_0 \sum_{k=1}^N g_k \hat{Q}_k \right) \hat{\rho}_S^p \otimes \hat{\tau}_B \right] \\
&= \frac{m_0 \omega_R^2}{2} \text{Tr}_S \left[\hat{Q}_0^2 \hat{\rho}_S^p \right] \times \text{Tr}_B \hat{\tau}_B \\
&\quad - \text{Tr}_S \left[\hat{Q}_0 \hat{\rho}_S^p \right] \times \sum_k g_k \text{Tr}_B \left[\hat{Q}_k \hat{\tau}_B \right] \\
&= \frac{m_0 \omega_R^2}{4} [\sigma_{\hat{\rho}_S^p}]_{11} \\
&= \frac{\omega_R^2}{4 \omega_0} \sqrt{[\sigma_{\hat{\omega}_{FM}}]_{11} [\sigma_{\hat{\omega}_{FM}}]_{22}};
\end{aligned} \tag{4.13}$$

pues

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_B \hat{\tau}_B &= 1, \\
\text{Tr}_B \left[\hat{Q}_k \hat{\tau}_B \right] &= 0 \quad \forall k
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
\sigma_{\hat{\rho}_S^p} &= \mathbf{S}_{\hat{U}_G} \sigma_{\hat{\omega}_{FM}} \mathbf{S}_{\hat{U}_G}^T \\
&= \sqrt{[\sigma_{\hat{\omega}_{FM}}]_{11} [\sigma_{\hat{\omega}_{FM}}]_{22}} \begin{pmatrix} \frac{1}{m_0 \omega_0} & 0 \\ 0 & m_0 \omega_0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

es la MC del estado pasivo de la batería obtenida tras aplicar por congruencia la matriz $\mathbf{S}_{\hat{U}_G}$ [ver (4.10)] sobre $\sigma_{\hat{\omega}_{FM}}$. Vale la pena mencionar que en el límite termodinámico (o caso continuo), los términos diagonales de la MC $\sigma_{\hat{\omega}_{FM}}$ en la ergotropía (4.8), el trabajo de desconexión (4.11) y el trabajo de conexión (4.13) pueden ser reemplazados por los términos diagonales de la MC $\sigma_S(+\infty)$ y así obtener los resultados reportados en Hovhannisyán et al. [12], cuyas deducciones son particulares del límite termodinámico y del estado estacionario $\hat{\rho}_S(+\infty)$.

De la Figura 4.3 se desprende para los casos continuo y discretos que W_c^{quench} presenta un crecimiento estricto tanto en función de γ como en función de ω_D . $W_c^{quench} \geq 0$ cuando $\gamma \geq 0$ y $\omega_D \geq 0$, entonces, siempre será necesario hacer trabajo sobre el sistema compuesto para restaurar la interacción entre el oscilador central que se halla en un estado pasivo y el nuevo baño que se halla en su estado térmico. A interacción nula, que son los casos $\gamma = \omega_D = 0$, el trabajo de conexión es consecuentemente nulo. La concordancia de W_c^{quench} entre los casos continuo y discretos persiste para un amplio rango de valores tanto de γ como de ω_D , sin embargo, el caso con muestra Lorentziana de frecuencias se ajusta mejor a los resultados del límite termodinámico.

4.1.2.3. Trabajo disipado

El trabajo disipado [ver (2.18)] se expresa por

$$\begin{aligned}
 W_{\text{dis}}^{\text{quench}} &= W_{\text{d}}^{\text{quench}} + W_{\text{c}}^{\text{quench}} - \mathcal{W}^{\text{quench}} \\
 &= \frac{1}{4} \left[m_0 (\omega_0^2 + \omega_{\text{R}}^2) [\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{11} - \frac{3}{m_0} [\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{22} + \frac{1}{\omega_0} (\omega_{\text{R}}^2 - 2\omega_0^2) \sqrt{[\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{11} [\sigma_{\omega_{\text{FM}}}]_{22}} \right].
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

De la figura 4.4 para los casos continuo y discretos se desprende que $W_{\text{dis}}^{\text{quench}}$ presenta un crecimiento estricto en función de γ y también de ω_{D} . $W_{\text{dis}}^{\text{quench}} \geq 0$ cuando $\gamma \geq 0$ y $\omega_{\text{D}} \geq 0$. En el caso de acoplamiento nulo, el ciclo no disipa energía, pero como ya fue mencionado, tampoco es posible extraer energía desde la batería.

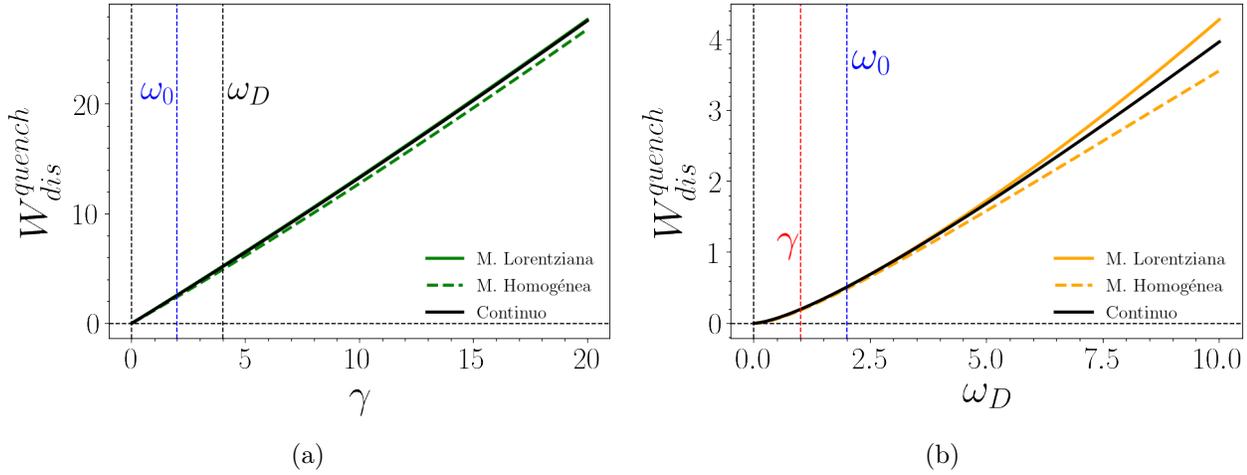


Figura 4.4: Trabajo disipado para los casos continuo y discretos en función de: (a) la fuerza del acoplamiento y (b) la frecuencia de corte. Para los tres casos se escoge $m_0 = 1$, la regularización de Lorentz-Drude, unidades tales que $\hbar = k_{\text{B}} = 1$, en el panel (a): $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\omega_{\text{D}} = 4$, y en el panel (b): $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\gamma = 1$. Para ambos casos discretos se escoge $m_k = 1 \forall k$ y $N = 150$, pero, en particular, para el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y para el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias se escoge $\omega_{\text{máx}} = 70$.

4.1.3. Eficiencia

Directamente de la definición de eficiencia escrita en el Capítulo 2 [ver (2.27)] se tiene que la eficiencia del ciclo es

$$\eta^{\text{quench}} = \frac{\mathcal{W}^{\text{quench}}}{W_{\text{d}}^{\text{quench}} + W_{\text{c}}^{\text{quench}}}. \tag{4.15}$$

De la Figura 4.5 (a) se desprende que la eficiencia en función de γ presenta un máximo en los tres casos, discretos y continuo. A grandes rasgos, el comportamiento de $W_d^{quench} + W_c^{quench}$ es creciente, monótono y concavo. Por otra parte, el comportamiento de \mathcal{W}^{quench} fuera del entorno de $\mathcal{W}^{quench} = 0$ es creciente, monótono y convexo [Figura 4.1 (a)]. De la Figura 4.5 (b) se desprende que en la medida que aumenta la temperatura, el valor del máximo de la eficiencia disminuye.

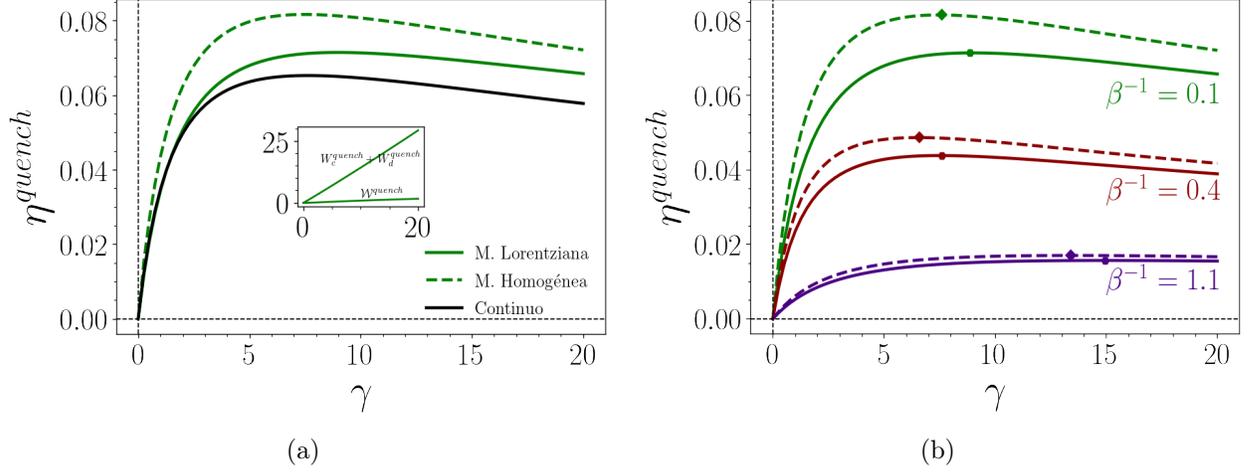


Figura 4.5: Eficiencia en función de γ : (a) eficiencia para los casos continuo y discretos donde se escoge $m_0 = 1$, $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$, la regularización de Lorentz-Drude con $\omega_D = 4$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Para ambos casos discretos se escoge $m_k = 1 \forall k$ y $N = 150$, pero, en particular, para el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$, y para el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias se escoge $\omega_{\text{máx}} = 70$. En el gráfico interior se muestra sin mayor detalle el comportamiento de $W_d^{quench} + W_c^{quench}$ y \mathcal{W}^{quench} para los parámetros ya indicados. (b) Eficiencia para los casos discretos con distintos valores de la temperatura. Curvas sólidas corresponden a muestra Lorentziana de frecuencias y curvas segmentadas corresponde a muestra homogénea de frecuencias. Para ambos casos se escoge $m_k = 1 \forall k$ y $N = 150$, pero, en particular, para el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y para el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias se escoge $\omega_{\text{máx}} = 70$. Se escoge $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$.

De la Figura 4.6 (a) se desprende que la eficiencia en función de ω_D presenta un máximo en $\omega_D = \omega_D^*$ en el caso continuo y el caso muestra Lorentziana, valor donde también W_d^{quench} alcanza su mínimo [ver Figura 4.2 (b)]. Al igual que la Figura 4.5 (a), a grandes rasgos, el comportamiento de $W_d^{quench} + W_c^{quench}$ es creciente, monótono y concavo, y el comportamiento de \mathcal{W}^{quench} es creciente, monótono y convexo. De la Figura 4.6 (b) se desprende que en la medida que aumenta el acoplamiento, el valor del máximo de la eficiencia aumenta y sufre un corrimiento hacia frecuencias de corte menores.

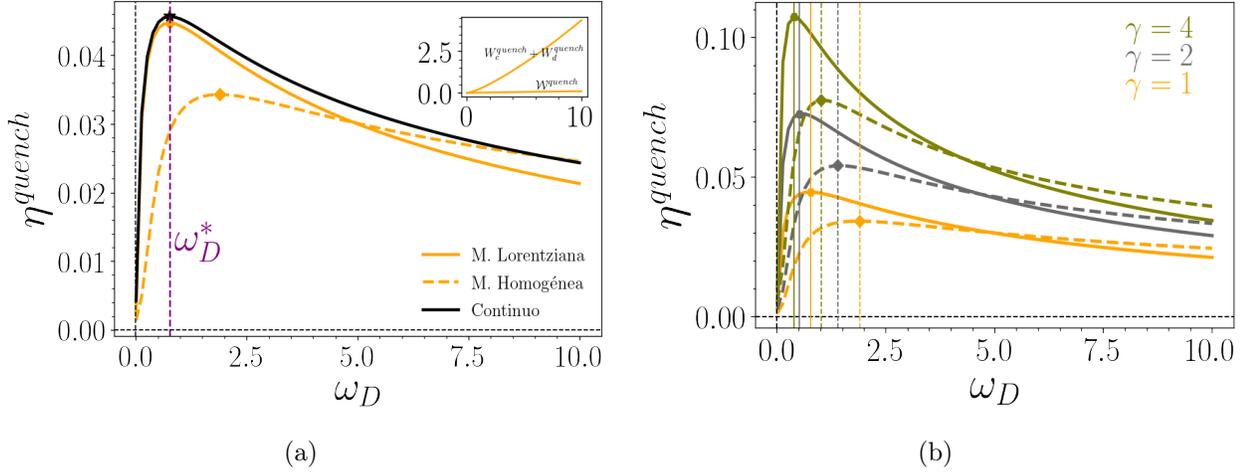


Figura 4.6: Eficiencia en función de ω_D : (a) eficiencia para los casos continuo y discretos. Para los tres casos se toma $m_0 = 1$, la regularización de Lorentz-Drude, $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$, $\gamma = 1$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Para ambos casos discretos se escoge $m_k = 1 \forall k$ y $N = 150$, pero, en particular, para el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$, y para el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias se escoge $\omega_{m\acute{a}x} = 70$. En el gráfico interior se muestra sin mayor detalle el comportamiento de $W_d^{quench} + W_c^{quench}$ y \mathcal{W}^{quench} para los parámetros ya indicados. (b) Eficiencia para casos discretos con distintos valores de γ . Curvas sólidas corresponden a muestra Lorentziana de frecuencias y curvas segmentadas corresponde a muestra homogénea de frecuencias. Para ambos casos se escoge $m_k = 1 \forall k$ y $N = 150$, pero, en particular, para el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$, y para el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias se escoge $\omega_{m\acute{a}x} = 70$. Se escoge $\omega_0 = 2$, $\beta^{-1} = 0.1$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$.

4.1.4. Proceso de carga y producción de entropía

Cuando se trabaja con un baño finito se debe tener en cuenta que es necesario escoger valores para los parámetros y en especial una muestra de frecuencias del baño con los cuales al final del proceso de carga se pueda reconocer y extraer la información del estado reducido cargado de la batería, el cual ocurre siempre y cuando el tiempo de equilibración, t_{eq} , es menor al tiempo de las recurrencias de Poincaré desde donde la batería tenderá a retornar a su estado inicial. El estado que llamamos de equilibrio es reconocible por la presencia de un comportamiento constante [ver Figuras 3.3, 3.5, 3.6 o 3.7, por ejemplo] que antecede al comportamiento recurrente de las entradas de la MC del estado de la batería en función del tiempo.

En la Figura 4.7 se comparan las entradas de la MC del estado de equilibrio con las entradas de la MC del estado Gibbsiano de fuerza media en el caso discreto con muestra Lorentziana de frecuencias y en el caso discreto con muestra homogénea de frecuencias. Se fijan tres de los parámetros ω_0 , ω_D , γ y β^{-1} , y para el parámetro libre se escogen ciertos valores para los cuales se implementa la evolución simpléctica y luego se extrae la MC del estado de equilibrio a un tiempo en que se observa la dinámica constante. Según los resultados numéricos

obtenidos se observa que $\text{Tr}_B[\hat{\Omega}_{\text{eq}}] \approx \hat{\omega}_{\text{FM}}$ aún cuando no se está en el límite termodinámico, cumpliéndose así numéricamente la condición de proceso cíclico para la batería.

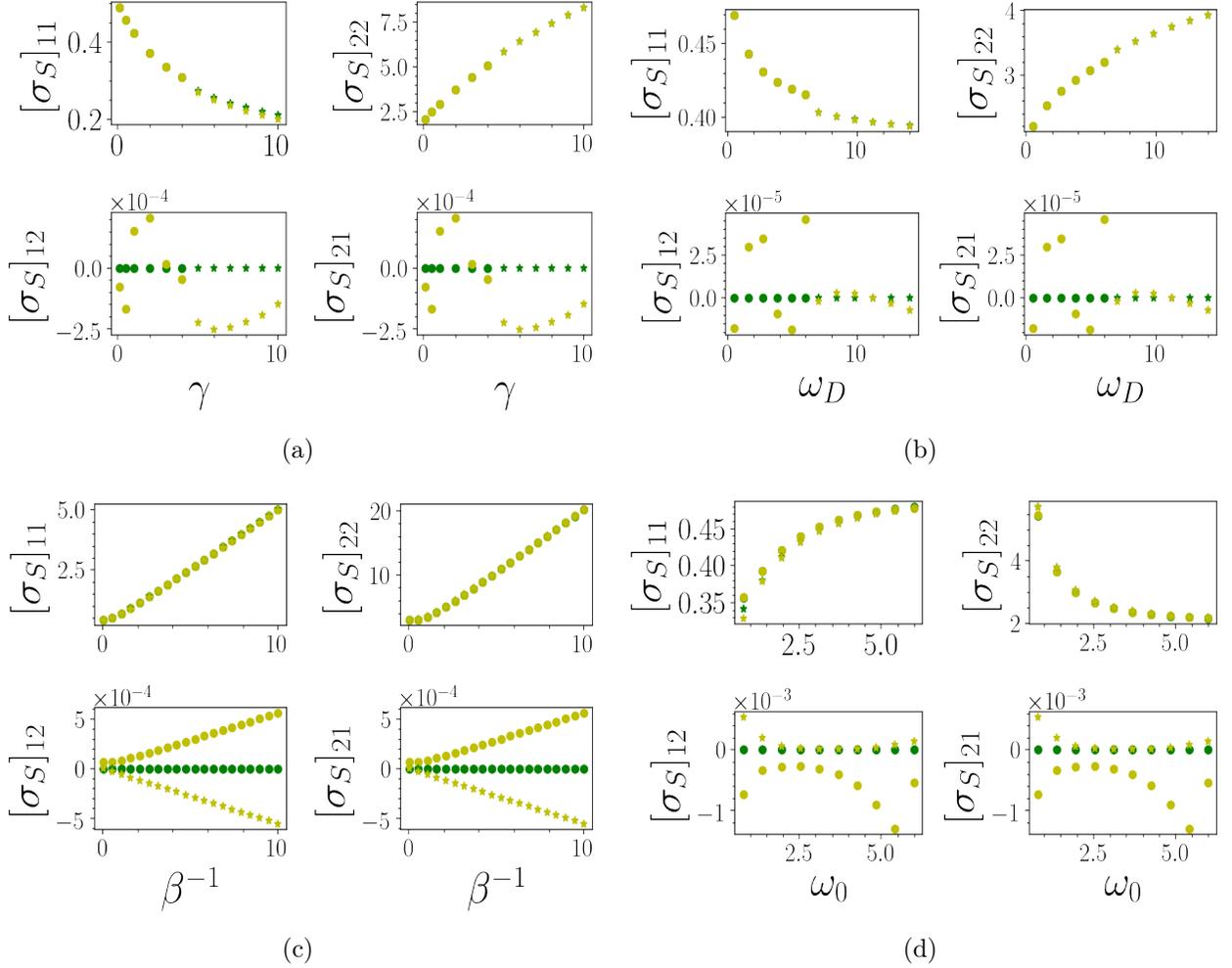


Figura 4.7: Comparación de las entradas de la MC asociada al estado de equilibrio de la batería tras el proceso de carga con la MC del estado Gibbsiano de fuerza media para los casos discretos con muestra Lorentziana y muestra homogénea de frecuencias. Los marcadores de color amarillo corresponde a la MC del estado de equilibrio y los marcadores verdes corresponden a la MC del estado de fuerza media. Los marcadores con forma circular están generados con la muestra Lorentziana de frecuencias y los marcadores con forma de estrella están generados con la muestra homogénea de frecuencias. En el panel (a) se deja como parámetro libre a γ ; en el panel (b) se deja como parámetro libre a ω_D ; en el panel (c) se deja como parámetro libre a β^{-1} y en el panel (d) se deja como parámetro libre a ω_0 . En los casos en que se fijan tres de los cuatro parámetros se escoge $\gamma = 1$, $\omega_D = 4$, $\beta^{-1} = 0.1$ y $\omega_0 = 2$. Para ambos casos se escoge $N = 150$, la regularización de Lorentz-Drude y $m_k = m_0 = 1 \forall k$. Para la muestra homogénea se escoge $\omega_{\text{máx}} = 70$ y para la muestra Lorentziana se escoge $a_0 = 1$ y $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$. Los datos escogidos tienen unidades tales que $\hbar = k_B = 1$.

Independientemente del número de osciladores del baño, la traza del término de interacción del modelo CL con respecto al estado del sistema compuesto a un instante t del proceso

de carga, $\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t) = \hat{U}_{\text{CL}}(t)\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}} \otimes \hat{\tau}_{\text{B}}\hat{U}_{\text{CL}}^{\dagger}(t)$ [ver evolución (3.61)], es

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[\left(\frac{m_0\omega_{\text{R}}^2}{2}\hat{Q}_0^2(0) - \hat{Q}_0(0) \sum_{k=1}^N g_k \hat{Q}_k(0) \right) \hat{\Omega}_{\text{tot}}(t) \right] &= -m_0 \left(\omega_0^2 + \frac{\omega_{\text{R}}^2}{2} \right) \text{Tr} \left[\hat{Q}_0^2(0)\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t) \right] \\ &+ \frac{1}{m_0} \text{Tr} \left[\hat{P}_0^2(0)\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t) \right] - \frac{d}{dt} \text{Tr} \left[\hat{Q}_0(0)\hat{P}_0(0)\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t) \right]; \end{aligned} \quad (4.16)$$

resultado que se obtiene de manera similar al cálculo hecho para $W_{\text{d}}^{\text{quench}}$ (4.11), es decir, donde se utilizan las ecuaciones de Heisenberg (3.15) y (3.17), la propiedad cíclica de la traza y la regla del producto para derivadas:

$$\frac{d}{dt} \left[\hat{Q}_0(t) \frac{d\hat{Q}_0(t)}{dt} \right] = \left(\frac{d\hat{Q}_0(t)}{dt} \right)^2 + \hat{Q}_0(t) \frac{d^2\hat{Q}_0(t)}{dt^2}.$$

El resultado (4.16) es válido $\forall t$ y depende solamente de los operadores de la batería. Luego, en el caso discreto, conforme a lo observado para la MC del estado $\text{Tr}_{\text{B}}\hat{\Omega}_{\text{eq}}$ donde se cumple que $\text{Tr}_{\text{B}}\hat{\Omega}_{\text{eq}} \approx \hat{\omega}_{\text{FM}}$, el tercer término en el lado derecho de (4.16) se anula cuando $t = t_{\text{eq}}$, y entonces en buena aproximación numérica concluimos que

$$\text{Tr} \left[\left(\frac{m_0\omega_{\text{R}}^2}{2}\hat{Q}_0^2(0) - \hat{Q}_0(0) \sum_{k=1}^N g_k \hat{Q}_k(0) \right) \hat{\Omega}_{\text{eq}} \right] \approx \text{Tr} \left[\left(\frac{m_0\omega_{\text{R}}^2}{2}\hat{Q}_0^2(0) - \hat{Q}_0(0) \sum_{k=1}^N g_k \hat{Q}_k(0) \right) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right], \quad (4.17)$$

donde el lado derecho se puede expresar como $-W_{\text{d}}^{\text{quench}}$ [ver (4.11)], lo cual depende solo de cantidades asociadas al estado de fuerza media. En la Figura 4.8 se grafica el comportamiento en el tiempo (proceso de carga) de la expresión (4.16), el cual converge al término del lado derecho de la igualdad numérica (4.17) cuando se alcanza el estado de equilibrio. Ocupando el resultado (4.17), se puede demostrar que

$$\begin{aligned} W_{\text{dis}}^{\text{quench}} &= \text{Tr} \left[\left(\frac{m_0\omega_{\text{R}}^2}{2}\hat{Q}_0^2 - \hat{Q}_0 \sum_k g_k \hat{Q}_k \right) \hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}} \otimes \hat{\tau}_{\text{B}} \right] \\ &- \text{Tr} \left[\left(\frac{m_0\omega_{\text{R}}^2}{2}\hat{Q}_0^2 - \hat{Q}_0 \sum_k g_k \hat{Q}_k \right) \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\ &+ \text{Tr}_{\text{S}} \left[\hat{H}_{\text{S}}\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}} \right] - \text{Tr}_{\text{S}} \left[\hat{H}_{\text{S}}\hat{\omega}_{\text{FM}} \right] \\ &\approx \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{CL}}\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}} \otimes \hat{\tau}_{\text{B}} \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{B}}\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}} \otimes \hat{\tau}_{\text{B}} \right] \\ &- \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{CL}}\hat{\Omega}_{\text{eq}} \right] + \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{B}}\hat{\Omega}_{\text{eq}} \right] \\ &= \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{B}}\hat{\Omega}_{\text{eq}} \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{B}}\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}} \otimes \hat{\tau}_{\text{B}} \right], \end{aligned} \quad (4.18)$$

es decir, que en buena aproximación numérica, el trabajo disipado es igual al cambio del valor esperado del Hamiltoniano libre del baño,

$$\hat{H}_{\text{B}} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\hat{P}_k^2}{2m_k} + \frac{m_k\omega_k^2}{2}\hat{Q}_k^2 \right),$$

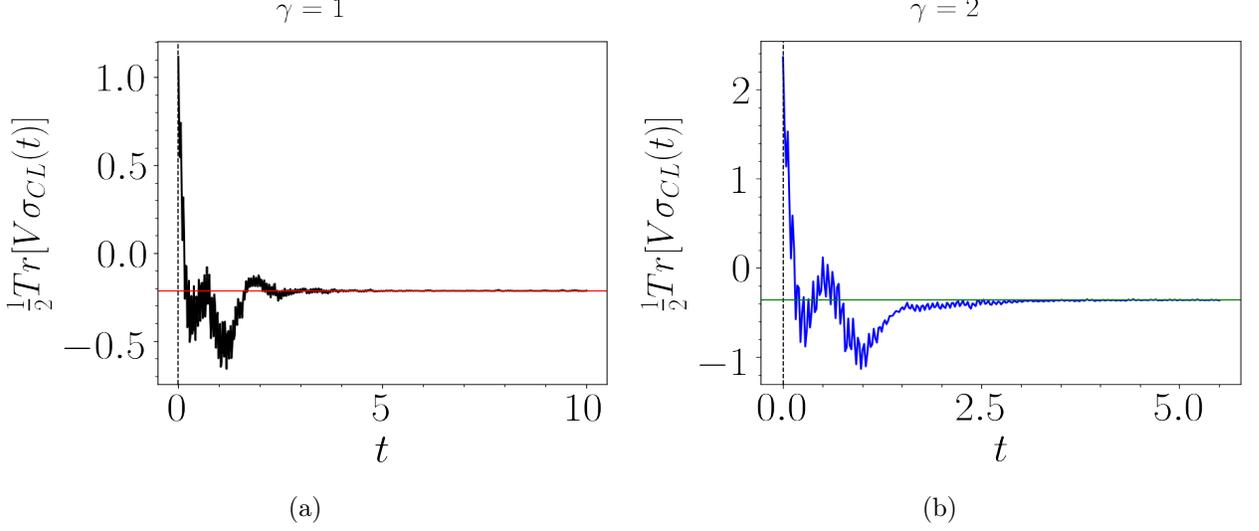


Figura 4.8: Evolución simpléctica del término del lado izquierdo de la expresión (4.16). V es la matriz Hamiltoniana asociada al Hamiltoniano de interacción del modelo CL y $\sigma_{CL}(t)$ es la MC del sistema compuesto a tiempo t en el proceso de carga [ver (3.94)]. En ambos paneles se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias, $N = 150$, $\omega_0 = 2$, $\omega_c = 4$, $\beta = 10$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$, $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. En el panel (a) se escoge $\gamma = 1$ y la línea de referencia roja corresponde al término del lado derecho de la igualdad numérica (4.17). En el panel (b) se escoge $\gamma = 2$ y la línea de referencia verde corresponde al término del lado derecho de la igualdad numérica (4.17). Las líneas de referencia (roja y verde) fueron calculadas a partir de la MC del estado $\hat{\tau}_{\text{tot}}$, $\sigma_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}$, que fue generada con los parámetros ya mencionados para cada panel. La condición inicial para ambos paneles es la MC asociada al estado $\hat{\rho}_S^p \otimes \hat{\tau}_B$, donde $\hat{\rho}_S^p$ depende del valor de γ respectivo.

con respecto a los estados reducidos del baño final e inicial del proceso de carga. En los límites termodinámico y $t \rightarrow +\infty$ las expresiones (4.17) y (4.18) son exactas. El lado derecho de la última igualdad en la expresión (4.18) se puede trabajar algebraicamente a partir de la identidad

$$\hat{H}_B = -\beta^{-1} \ln \hat{\tau}_B - \beta^{-1} \ln \left[\text{Tr}_B[\exp(-\beta \hat{H}_B)] \right] \quad (4.19)$$

y concluir que

$$\frac{W_{\text{dis}}^{\text{quench}}}{T} \approx \Delta S_B^{\text{carga}} + D \left(\text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}} \| \hat{\tau}_B \right), \quad (4.20)$$

donde

$$\Delta S_B^{\text{carga}} = S \left(\text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}} \right) - S \left(\hat{\tau}_B \right) \quad (4.21)$$

es el cambio de entropía de von Neumann de los estados (final e inicial) del baño en el proceso de carga y

$$D \left(\text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}} \| \hat{\tau}_B \right) = \text{Tr}_B \left[\text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}} \left(\ln \text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}} - \ln \hat{\tau}_B \right) \right] \quad (4.22)$$

es la entropía relativa entre el estado final y el estado inicial del baño en el proceso de carga. El cambio de la entropía de von Neumann de los estados (final e inicial) de la batería en el proceso de carga es nulo debido a que el estado pasivo (inicial) de la batería es el resultado

de la transformación unitaria de extracción de la ergotropía desde su estado cargado (final), entonces el lado derecho de la igualdad (4.20) es equivalente a la fórmula para la producción de entropía, Σ^{ELB} , que se reporta en Esposito et al. [63], quienes establecen que la producción de entropía en un proceso con condición inicial de estado producto entre el estado de un sistema y el estado térmico de un baño, que en conjunto evolucionan unitariamente por medio de un Hamiltoniano independiente del tiempo, se expresa por

$$\Sigma^{\text{ELB}} = \Delta S_S + \Delta S_B + D(\hat{\rho}_B(t) || \hat{\tau}_B), \quad (4.23)$$

con ΔS_S y ΔS_B los cambios de entropía de von Neumann del sistema y del baño en el proceso, respectivamente, y $\hat{\rho}_B(t)$ el estado reducido del baño a tiempo t de la evolución. El término $\Delta S_S + \Delta S_B$ es una forma particular que adopta un término más general llamado *información mutua*, $\mathcal{I}_{S \cup B}(S : B)$, el cual es no negativo y para cualquier sistema bipartito $S \cup B$ se define por [63, 103]

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{S \cup B}(S : B) &\equiv D(\hat{\rho}_{S \cup B} || \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_B) \\ &= S(\hat{\rho}_S) + S(\hat{\rho}_B) - S(\hat{\rho}_{S \cup B}). \end{aligned} \quad (4.24)$$

$\mathcal{I}_{S \cup B}(S : B)$ representa una medida de las correlaciones totales, clásicas y genuinamente cuánticas, entre el sistema S y el sistema B [104, 105]. Según la expresiones para la producción de entropía (4.23) y el trabajo disipado (4.20), concluimos que la producción de entropía del proceso de carga, $\Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}}$, satisface la igualdad numérica –exacta en el límite termodinámico–

$$\Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}} \approx \frac{W_{\text{dis}}^{\text{quench}}}{T}. \quad (4.25)$$

Por la no negatividad de la entropía relativa y de la información mutua se cumple que $\Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}} \geq 0$ [63]. Solo en el proceso de carga existe producción de entropía, en los procesos de conexión y desconexión no lo hay dado que se implementaron con un protocolo quench intantatáneo que conserva el estado del sistema compuesto, por lo tanto se identifica a $\Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}}$ como la producción de entropía del ciclo, $\Sigma(t_d, t_c) = W_{\text{dis}}(t_d, t_c)/T \geq 0$ (con $t_d = t_c = 0$), mencionada en el Capítulo 2 [ver (2.25)]. En sistemas clásicos/macroscópicos (cl), donde la energía de interacción entre un sistema y un baño térmico es despreciada, es usual enunciar la segunda ley de la termodinámica en términos de la producción de entropía en el proceso, Σ^{cl} , el cambio de entropía del sistema, ΔS^{cl} , y un término asociado al calor, Q^{cl} , compartido entre el sistema y el baño:

$$\Sigma^{\text{cl}} = \Delta S^{\text{cl}} - \frac{Q^{\text{cl}}}{T} \geq 0. \quad (4.26)$$

El calor corresponde al flujo de energía que entra al sistema producto del cambio de energía del baño, el cual se asume que posee una capacidad calórica infinita. Ahora, tomando en cuenta el caso clásico, reescribimos la expresión (4.25) como

$$\Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}} = -\frac{Q^{\text{quench}}}{T}, \quad (4.27)$$

donde al término Q^{quench} lo llamaremos *calor* y lo definimos como

$$\begin{aligned} Q^{\text{quench}} &\equiv -\left(\text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}} \right] - \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \hat{\tau}_B \right] \right) \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_B \sigma_{\hat{\tau}_B} \right] - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_B \sigma_{\hat{\rho}_B^{\text{eq}}} \right] \\ &\approx -W_{\text{dis}}^{\text{quench}} \\ &\leq 0, \end{aligned} \quad (4.28)$$

donde \mathbf{H}_B es la matriz Hamiltoniana asociada al Hamiltoniano libre del baño \hat{H}_B , $\sigma_{\hat{\tau}_B}$ es la MC del estado térmico del baño $\hat{\tau}_B$ y $\sigma_{\hat{\rho}_B^{\text{eq}}}$ es la MC del estado reducido del baño $\hat{\rho}_B^{\text{eq}} \equiv \text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}}$.

En la Figura 4.9 se comparan el calor del proceso de carga y el término $-W_{\text{dis}}^{\text{quench}}$ en función de los parámetros γ , ω_D , β^{-1} y ω_0 . Con respecto a los parámetros γ y ω_D , la primera mitad de los valores escogidos provienen de la evolución simpléctica generada con una muestra Lorentziana de frecuencias y la segunda mitad con una muestra homogénea de frecuencias; esto se hace para poder extraer la MC del estado reducido del baño al final del proceso de carga, $\text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}}$. Con respecto a los parámetros β^{-1} y ω_0 los datos se generan tanto con una muestra Lorentziana de frecuencias como con una muestra homogénea de frecuencias en todos los valores escogidos para β^{-1} y ω_0 con los que se implementa la evolución simpléctica. En todos los casos se confirma la validez numérica del resultado (4.18), que $Q^{\text{quench}} \leq 0$ y que entonces $\Sigma(t_d = 0, t_c = 0) = \Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}} \geq 0$. Es importante mencionar que como numéricamente

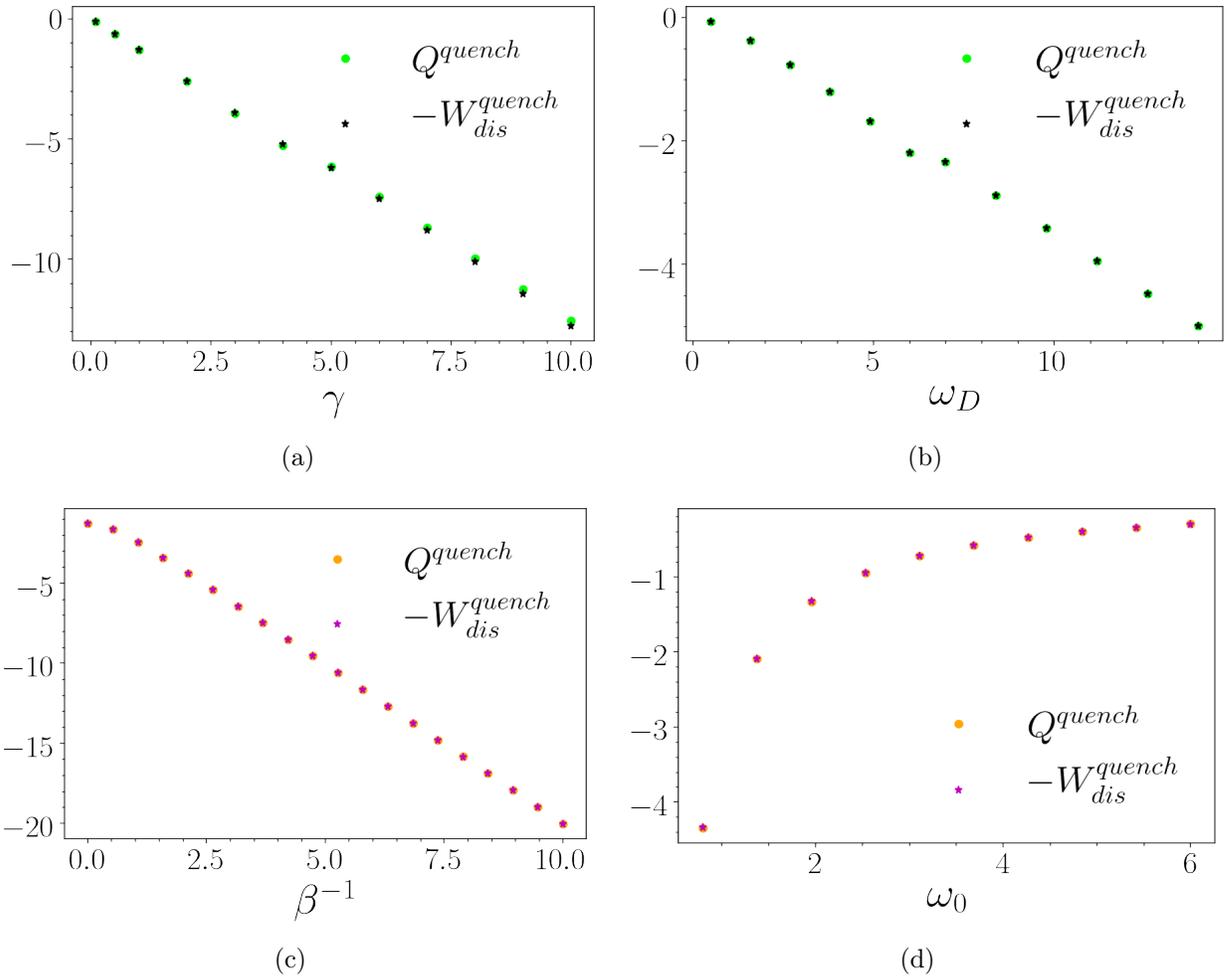


Figura 4.9: Comparación entre Q^{quench} y $-W_{\text{dis}}^{\text{quench}}$ con respecto a γ , ω_D , β^{-1} y ω_0 en unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. En cada panel se escogen los mismos parámetros y condiciones que las escogidas para los paneles (a), (b), (c) y (d) de la Figura 4.7, respectivamente.

se cumple que $0 \leq T\Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}} = W_{\text{dis}}^{\text{quench}}$ y dado que la ergotropía es por construcción una cantidad positiva, entonces se obtiene que $0 \leq T\Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}} \leq W_{\text{d}}^{\text{quench}} + W_{\text{c}}^{\text{quench}}$ y por lo tanto

la eficiencia del ciclo [ver (4.15)] está acotada por 1, pues

$$\begin{aligned}\eta^{\text{quench}} &= \frac{W_c^{\text{quench}} + W_d^{\text{quench}} - W_{\text{dis}}^{\text{quench}}}{W_c^{\text{quench}} + W_d^{\text{quench}}} \\ &\approx 1 - \frac{T\Sigma_{\text{carga}}^{\text{quench}}}{W_c^{\text{quench}} + W_d^{\text{quench}}} \\ &\leq 1.\end{aligned}\tag{4.29}$$

Esta última desigualdad es exacta en el límite termodinámico y es concordante con la cota para la eficiencia [ver (2.28)] obtenida en el Capítulo 2.

4.2. Ciclos con protocolos de desconexión dependientes del tiempo y protocolo de conexión tipo quench

Para estos ciclos de carga y descarga de la batería se implementa la segunda metodología del protocolo de desconexión comentada al inicio del capítulo. Se ocupan dos opciones de parámetros adimensionales dependientes del tiempo, $\lambda(t)$, para modular la desconexión y lograr la desconexión total entre la batería y el baño a un tiempo t_d . $\lambda(0) = 1$, $\lambda(t_d) = 0$ y por cada tiempo de duración de la desconexión t_d se tendrá un ciclo distinto. Los parámetros adimensionales son

$$\lambda_1(t) = 1 - \frac{t}{t_d} \quad \text{y} \quad \lambda_2(t) = \frac{1}{8t/t_d + 1} \left(1 - \frac{t}{t_d}\right)^6 \quad [\text{ver Figura 4.10}]. \tag{4.30}$$

El proceso de desconexión corresponde a un proceso unitario representado por el operador

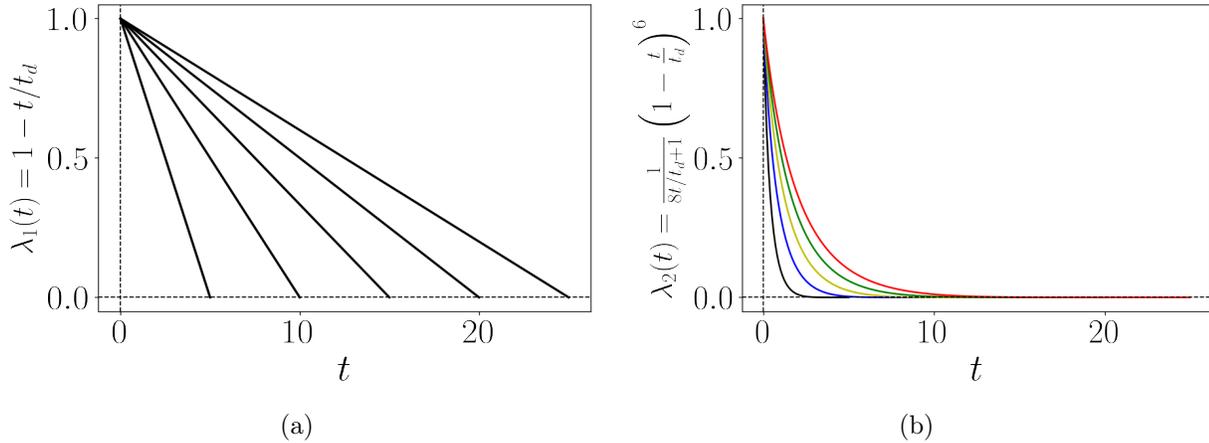


Figura 4.10: Parámetros adimensionales que modulan el proceso de desconexión en función del tiempo. En el panel (a) se muestra el comportamiento de $\lambda_1(t)$ y en el panel (b) se muestra el comportamiento de $\lambda_2(t)$. Se escogen cinco tiempos de desconexión, t_d , diferentes para cada parámetro.

de evolución temporal

$$\hat{U}_d(t) = \mathcal{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_{\text{CL}}(t')\right) \quad (\text{con } t \in [0, t_d]), \tag{4.31}$$

el cual está generado por el Hamiltoniano dependiente del tiempo

$$\hat{H}_{\text{CL}}(t) = \frac{\hat{P}_0^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega_0^2}{2}\hat{Q}_0^2 + \lambda(t)^2\frac{m_0\omega_{\text{R}}^2}{2}\hat{Q}_0^2 + \sum_{k=1}^N \left(\frac{\hat{P}_k^2}{2m_k} + \frac{m_k\omega_k^2}{2}\hat{Q}_k^2 \right) - \lambda(t)\hat{Q}_0 \sum_{k=1}^N g_k\hat{Q}_k. \quad (4.32)$$

La condición inicial escogida para los ciclos es $\hat{\tau}_{\text{tot}} = \exp(-\beta\hat{H}_{\text{CL}}(0))/\text{Tr}[\exp(-\beta\hat{H}_{\text{CL}}(0))]$ (con $\hat{H}_{\text{CL}}(0) = \hat{H}_{\text{CL}}$), es decir, es la misma que en la sección anterior. Se escoge un baño finito y la evolución del protocolo de desconexión se implementa numéricamente por medio de la evolución simpléctica

$$\mathbf{S}_{\text{d}}(t) = \mathcal{T} \exp \left(\int_0^t dt' 2\Omega \mathbf{H}_{\text{CL}}(t') \right) \quad (4.33)$$

asociada al operador (4.31) y que está generada por la matriz Hamiltoniana dependiente del tiempo, $\mathbf{H}_{\text{CL}}(t)$, asociada al Hamiltoniano (4.32). Luego de aplicado el proceso de desconexión la batería queda en el estado $\hat{\rho}_{\text{S}}(t_{\text{d}}) \equiv \text{Tr}_{\text{B}}[\hat{U}_{\text{d}}(t_{\text{d}})\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_{\text{d}}^\dagger(t_{\text{d}})]$ con MC $\sigma_{\hat{\rho}_{\text{S}}(t_{\text{d}})}$, el cual puede o no poseer carga, y al final del proceso de extracción de la ergotropía la batería queda en su estado pasivo que depende del parámetro temporal t_{d} y está caracterizado por la MC $\sigma_{\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}}(t_{\text{d}})}$ (4.5). En las Figuras 4.11 y 4.12 se muestran respectivamente el valor promedio de la energía y la entropía de von Neumann de la batería al final de los procesos de desconexión en función de los tiempos t_{d} 's; se desprende que en los protocolos de desconexión con tiempos de duración mayores a cierto tiempo t_{d}^* , la energía y la entropía de la batería al final del proceso serán la de su estado Gibbsiano pasivo $\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{tco}} \equiv \exp(-\beta\hat{H}_{\text{S}})/\text{Tr}_{\text{S}}[\exp(-\beta\hat{H}_{\text{S}})]$. En efecto, se concluye que el estado de la batería en $t_{\text{d}} \geq t_{\text{d}}^*$ es $\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{tco}}$, lo cual también se justifica en que el proceso de desconexión es un proceso disipativo donde la batería se acopla débilmente al baño cuando la evolución tiende a la desconexión total. En particular, dado el valor de la temperatura escogida ($\beta = 10$ con $k_{\text{B}} = 1$), vemos que $\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{tco}} \approx |0\rangle\langle 0|$ (estado basal). En el Apéndice C se detalla cómo implementamos la evolución de desconexión y se muestra que en los procesos de desconexión con tiempos de duración mayores a un t_{d}^* la MC de la batería al final de la desconexión es la MC del estado $\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{tco}}$. Se destaca que en el tratamiento numérico de estos ciclos solo se abordó el caso discreto con una muestra Lorentziana de frecuencias del baño y los acoplamientos generados con la regularización de Lorentz-Drude. En esta sección se eligen distintos valores de γ tales que inicialmente la batería se encuentra cargada, pero los parámetros ω_{D} , β^{-1} y ω_0 se fijan en los valores indicados en las descripciones de las figuras. A continuación se detallan las expresiones para el cálculo de las cantidades asociadas a las energéticas de los ciclos y sus desempeños, y también se reportan los resultados numéricos obtenidos.

4.2.1. Ergotropía, $\mathcal{W}(t_{\text{d}})$

Para cada t_{d} la ergotropía de la batería se expresa por

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(t_{\text{d}}) &= \text{Tr}_{\text{S}} \left[\hat{H}_{\text{S}}\hat{\rho}_{\text{S}}(t_{\text{d}}) \right] - \text{Tr}_{\text{S}} \left[\hat{H}_{\text{S}}\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}}(t_{\text{d}}) \right] \\ &= \frac{1}{2}\text{Tr}[\mathbf{H}_{\text{S}}\sigma_{\hat{\rho}_{\text{S}}(t_{\text{d}})}] - \frac{1}{2}\text{Tr}[\mathbf{H}_{\text{S}}\sigma_{\hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}}(t_{\text{d}})}]. \end{aligned} \quad (4.34)$$

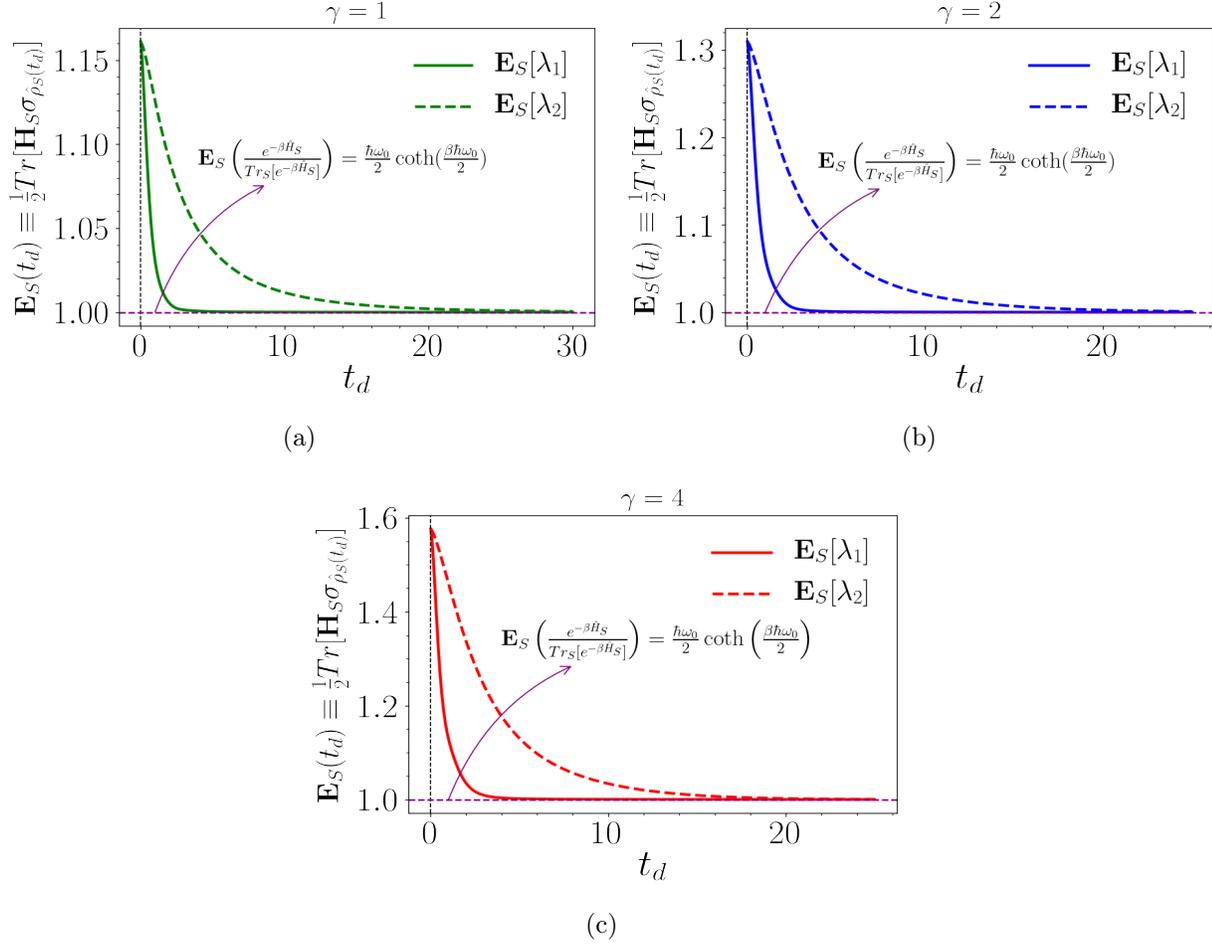


Figura 4.11: Energía de la batería en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

De la Figura 4.13 se desprende que para ambos protocolos de desconexión, λ_1 y λ_2 , la ergotropía de la batería al final de la desconexión decrece monótonamente en la medida que la duración de la desconexión es mayor. En ambos protocolos existe un tiempo de duración de la desconexión para el cual la ergotropía es nula y para duraciones mayores a este tiempo la ergotropía permanece nula. En la desconexión con protocolo $\lambda_2(t)$ la batería permanece cargada al final de la desconexión en protocolos más duraderos en comparación con la desconexión con λ_1 , pero en la medida que aumenta γ , los t_d 's para los cuales la batería permanece con carga al final de la desconexión disminuyen. Finalmente, si se requiere contar con más ergotropía al final de la desconexión, es conveniente que la desconexión sea lo más cercana a un quench instantáneo (con $t_d = 0$), es decir, conviene implementar el ciclo de la sección anterior.

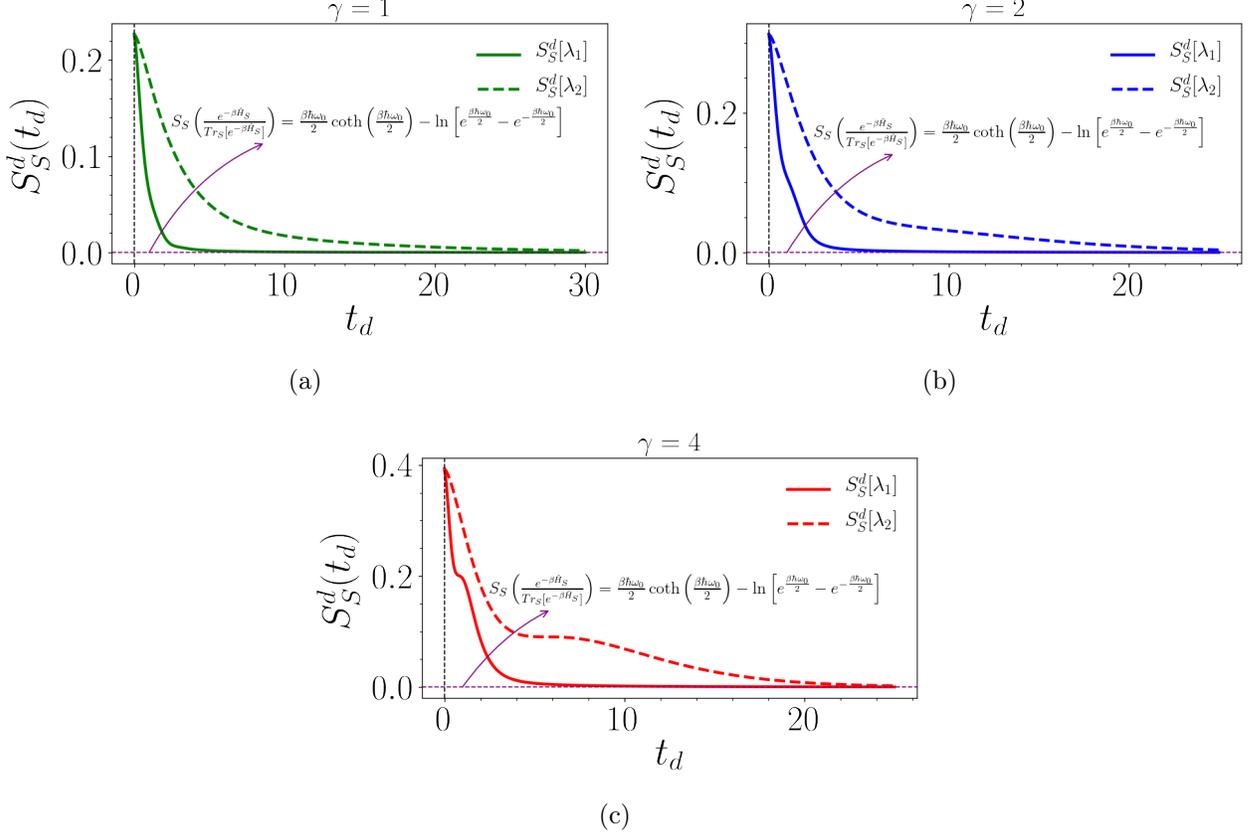


Figura 4.12: Entropía de la batería en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

4.2.2. Trabajo de desconexión, $W_d(t_d)$

Para cada t_d el costo del proceso de desconexión se expresa por

$$\begin{aligned}
 W_d(t_d) &= \text{Tr} \left[(\hat{H}_S + \hat{H}_B) \hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d) \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{CL}} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
 &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[(\mathbf{H}_S \oplus \mathbf{H}_B) \sigma_{\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d)} \right] - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_{\text{CL}} \sigma_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \right];
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

donde $\sigma_{\hat{\tau}_{\text{tot}}}$ es la MC del estado $\hat{\tau}_{\text{tot}}$ y $\sigma_{\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d)} \equiv \mathbf{S}_d(t_d) \sigma_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} \mathbf{S}_d(t_d)^T$ es la MC del estado $\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d) \equiv \hat{U}_d(t_d) \hat{\tau}_{\text{tot}} \hat{U}_d^\dagger(t_d)$. De la Figura 4.14 se desprende que para ambos protocolos de desconexión $W_d(t_d)$ decrece monótonamente, más aún, $W_d(t_d)$ presenta un cambio de signo, siendo positivo para protocolos de muy corta duración y negativo para protocolos de duración mayor. Que $W_d(t_d)$ sea negativo implica que el agente que genera la desconexión extrae energía del sistema compuesto para que el proceso se lleve a cabo. En la medida que t_d aumenta, $W_d(t_d)$ presenta un comportamiento asintótico para ambos protocolos y cuyos valores dependen del γ escogido. Conforme aumenta γ , aumenta el valor de $|W_d(t_d)|$ con t_d fijo.

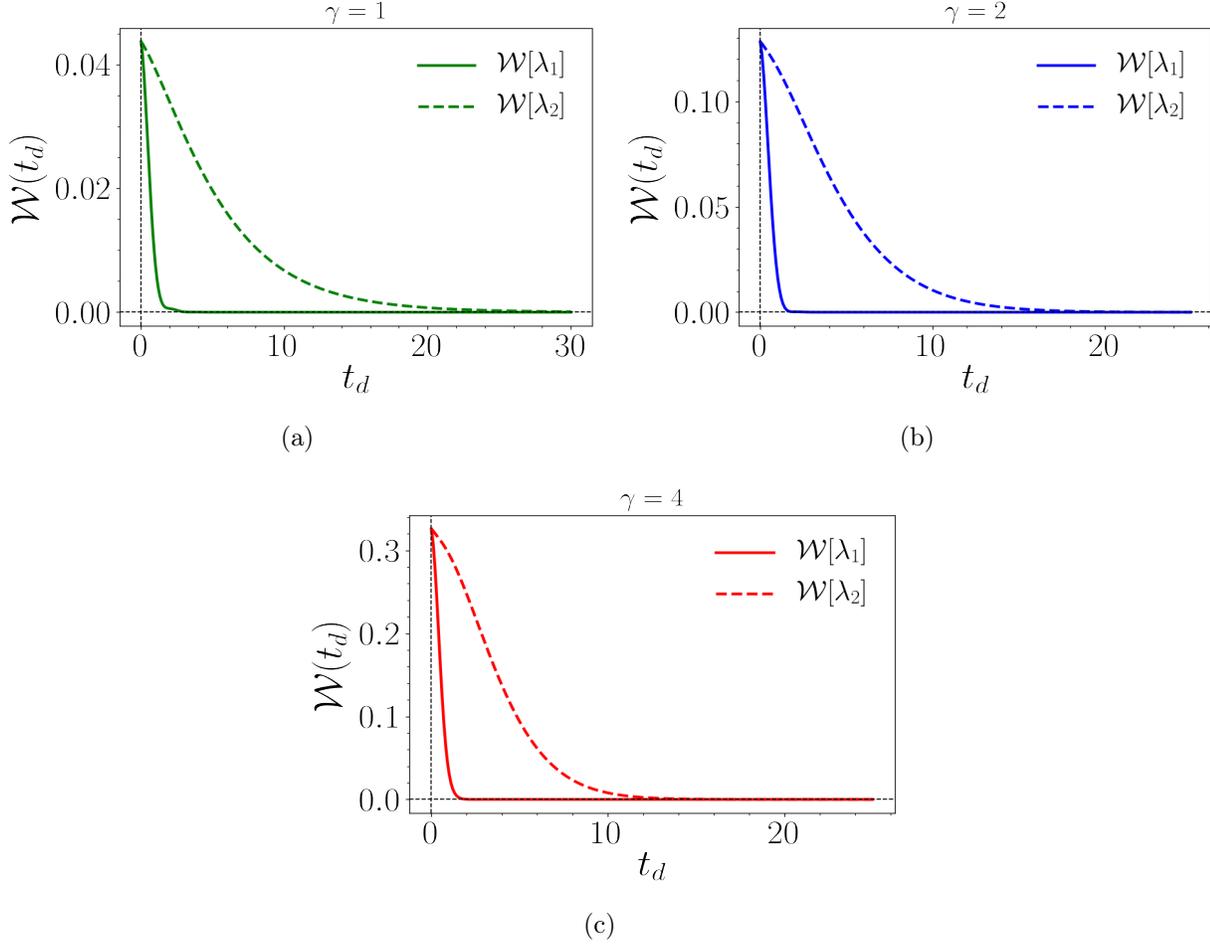


Figura 4.13: Ergotropía en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

4.2.3. Trabajo de conexión, $W_c(t_d)$

Para cada t_d el costo de reconectar la batería en su estado pasivo a un nuevo baño por medio de un quench es

$$\begin{aligned}
 W_c(t_d) &= \text{Tr} \left[\left(\frac{m_0 \omega_R^2}{2} \hat{Q}_0^2(0) - \hat{Q}_0(0) \sum_{k=1}^N g_k \hat{Q}_k \right) \hat{\rho}_S^P(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \right] \\
 &= \frac{m_0 \omega_R^2}{4} [\sigma_{\hat{\rho}_S^P(t_d)}]_{11}.
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

De la Figura 4.15 se desprende que para ambos protocolos el comportamiento de $W_c(t_d)$ es decreciente y converge al valor del trabajo de desconexión calculado con el estado pasivo $\hat{\rho}_S^{\text{tco}}$, lo cual se justifica en que al final del proceso de desconexión el estado resultante de la batería a tiempos t_d tardíos es el estado $\hat{\rho}_S^{\text{tco}}$, por lo que luego no existe extracción de ergotropía y

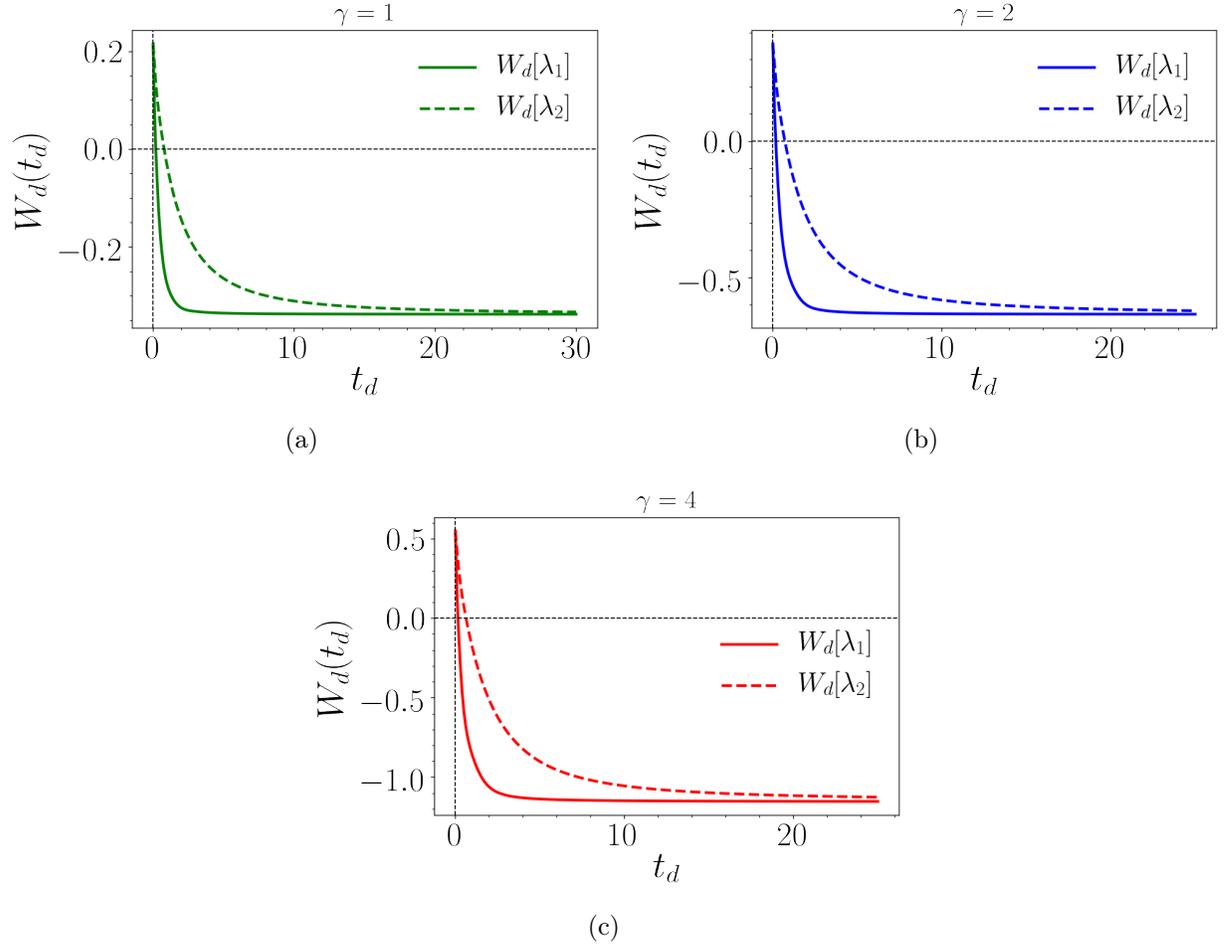


Figura 4.14: Trabajo de desconexión en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

la batería permanece en aquel estado cuando se reconecta al nuevo baño. Para los distintos valores de γ escogidos se observa que $W_c(t_d)$ es positivo, es decir, se tiene que invertir energía para reconectar.

4.2.4. Trabajo disipado, $W_{\text{dis}}(t_d)$

Para cada t_d el trabajo disipado se define, al igual que en el ciclo de la sección anterior, por

$$W_{\text{dis}}(t_d) = W_d(t_d) + W_c(t_d) - \mathcal{W}(t_d). \quad (4.37)$$

De la Figura 4.16 se desprende que para ambos protocolos el trabajo disipado es positivo

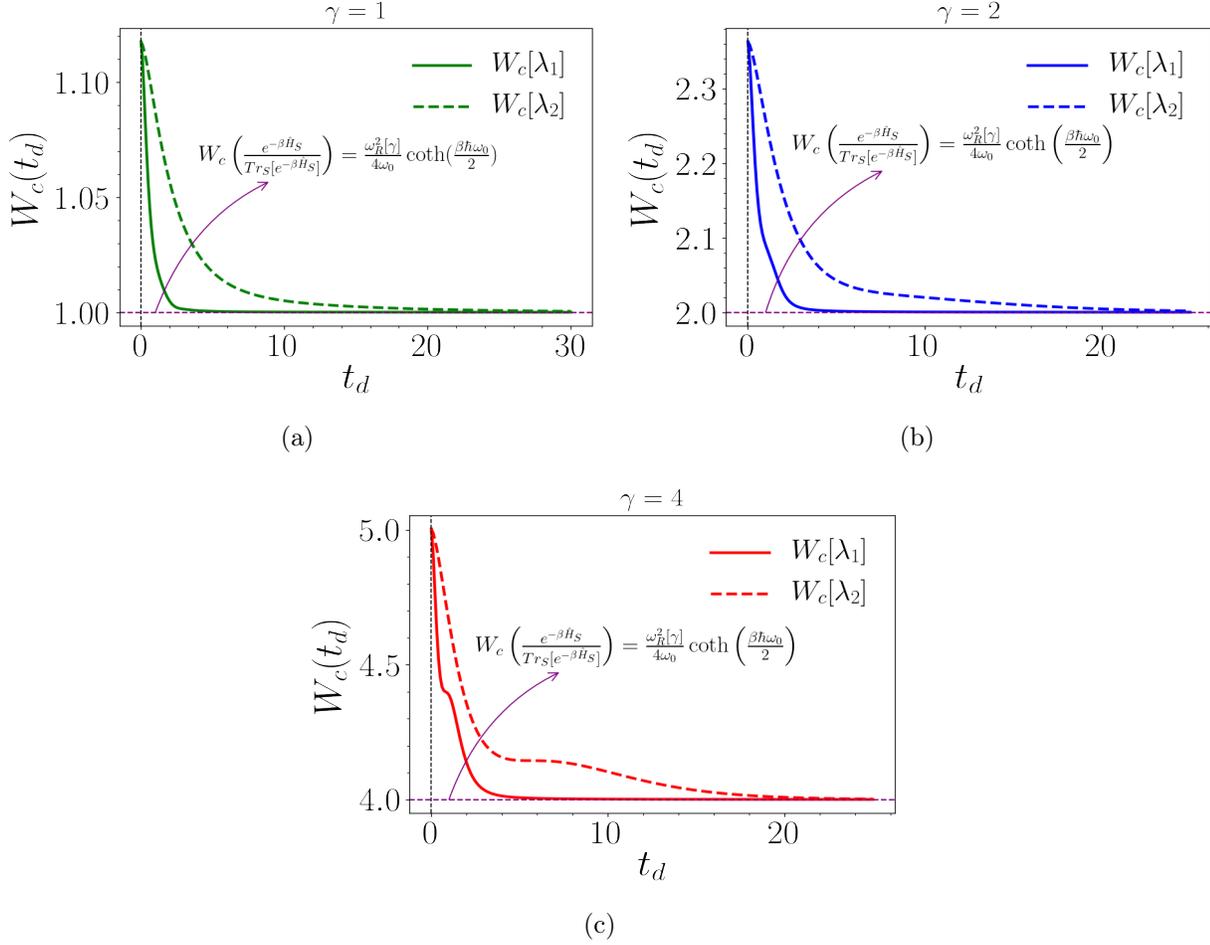


Figura 4.15: Trabajo de conexión en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

según los valores escogidos para los parámetros, es decir, independientemente de que se pueda extraer o no ergotropía desde la batería, el ciclo conlleva una inversión de energía para poder realizarlo, no obstante, dado que $W_{\text{dis}}(t_d)$ decrece en términos de t_d , en casos en que la batería no dispone de ergotropía, este costo es menor y tiende a ser constante para los ciclos con protocolos de desconexión con t_d 's cada vez mayores.

Usando el resultado para la igualdad numérica (4.17), vemos que el trabajo disipado en el ciclo

$$\begin{aligned}
W_{\text{dis}}(t_d) &= \left(\text{Tr} \left[(\hat{H}_S + \hat{H}_B) \hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d) \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{CL}} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \right) \\
&+ \text{Tr} \left[\left(\frac{m_0 \omega_R^2}{2} \hat{Q}_0^2 - \hat{Q}_0 \sum_k g_k \hat{Q}_k \right) \hat{\rho}_S^p(t_d) \otimes \hat{\tau}_B \right] \\
&+ \left(\text{Tr}_S \left[\hat{H}_S \hat{\rho}_S^p(t_d) \right] - \text{Tr}_S \left[\hat{H}_S \text{Tr}_B \hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d) \right] \right)
\end{aligned}$$

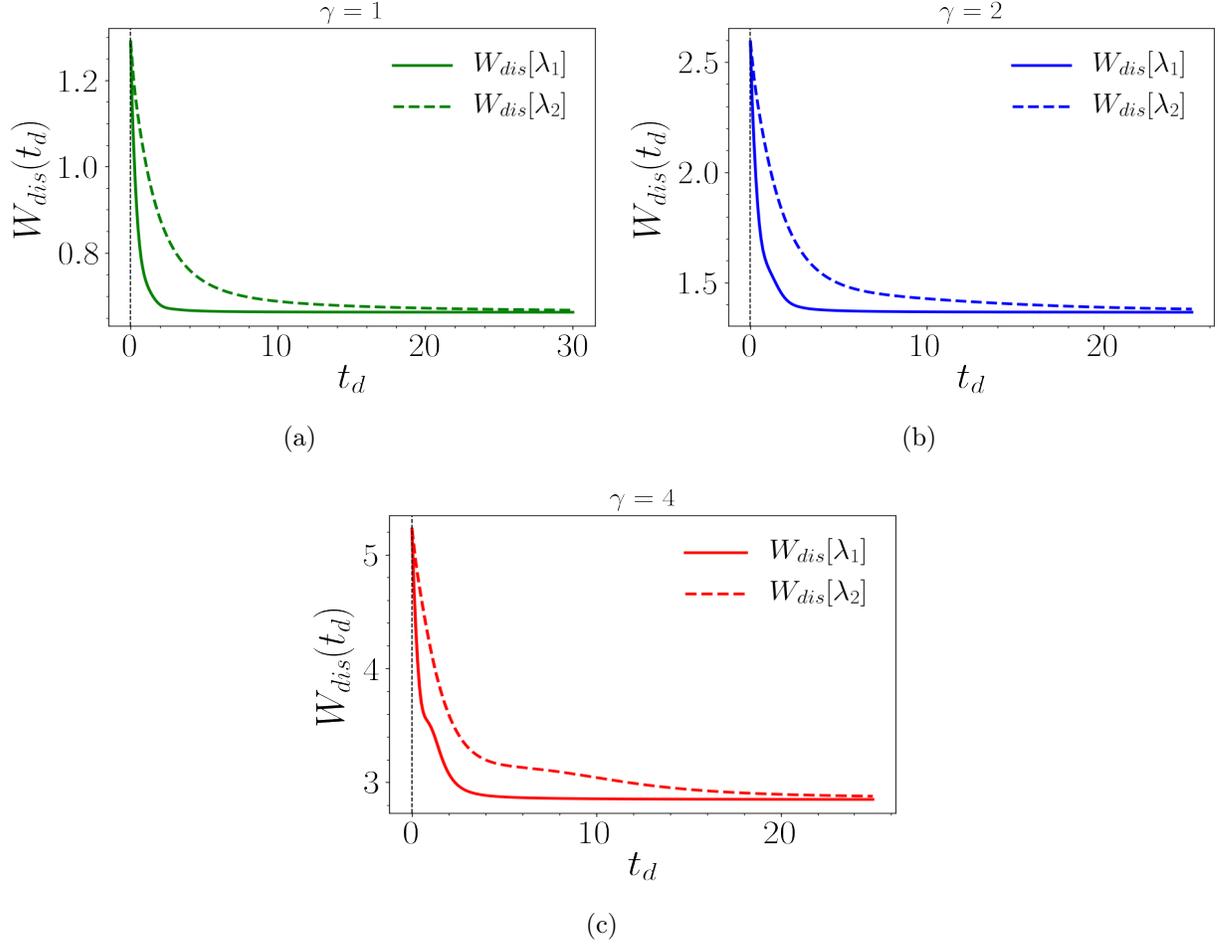


Figura 4.16: Trabajo disipado en función de t_d para distintos valores de γ calculado con las expresiones (4.34), (4.35) y (4.36). Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

$$\begin{aligned}
&= \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{CL}} \hat{\rho}_{\text{S}}^{\text{p}}(t_d) \otimes \hat{\tau}_{\text{B}} \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{CL}} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&+ \text{Tr}_{\text{B}} \left[\hat{H}_{\text{B}} \text{Tr}_{\text{S}} \hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d) \right] - \text{Tr}_{\text{B}} \left[\hat{H}_{\text{B}} \hat{\tau}_{\text{B}} \right] \\
&= \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{CL}} \hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d) \right] - \text{Tr} \left[\hat{H}_{\text{CL}} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \\
&+ \text{Tr}_{\text{B}} \left[\hat{H}_{\text{B}} \text{Tr}_{\text{S}} \hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d) \right] - \text{Tr}_{\text{B}} \left[\hat{H}_{\text{B}} \hat{\tau}_{\text{B}} \right] \\
&\approx \left(\text{Tr}_{\text{B}} \left[\hat{H}_{\text{B}} \text{Tr}_{\text{S}} \hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d) \right] - \text{Tr}_{\text{B}} \left[\hat{H}_{\text{B}} \hat{\tau}_{\text{B}} \right] \right) \\
&+ \left(\text{Tr}_{\text{B}} \left[\hat{H}_{\text{B}} \text{Tr}_{\text{S}} \hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d) \right] - \text{Tr}_{\text{B}} \left[\hat{H}_{\text{B}} \text{Tr}_{\text{S}} \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] \right) \\
&\equiv -[Q^{\text{carga}}(t_d) + Q_{\text{d}}(t_d)],
\end{aligned} \tag{4.38}$$

donde al término $Q^{carga}(t_d)$ lo llamamos calor del proceso de carga y lo definimos como:

$$\begin{aligned} Q^{carga}(t_d) &\equiv \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \hat{\tau}_B \right] - \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d) \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_B \sigma_{\hat{\tau}_B} \right] - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_B \sigma_{\hat{\rho}_B(t_d)} \right]; \end{aligned} \quad (4.39)$$

con $\hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d)$ el estado del sistema compuesto al final del proceso de carga; el cual depende del estado pasivo de la batería, $\hat{\rho}_S^p(t_d)$, y donde $\sigma_{\hat{\rho}_B(t_d)}$ es la MC del estado reducido del baño $\hat{\rho}_B(t_d) \equiv \text{Tr}_S[\hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d)]$. A partir de la primera igualdad en (4.39), analíticamente se puede demostrar que

$$-\frac{Q^{carga}(t_d)}{T} = \Delta S_B^{carga}(t_d) + D \left(\text{Tr}_S[\hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d)] \parallel \hat{\tau}_B \right), \quad (4.40)$$

donde $\Delta S_B^{carga}(t_d) = S(\text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d)) - S(\hat{\tau}_B)$. $Q^{carga}(t_d)$ es similar al término que denominamos calor del proceso de carga del ciclo de la sección anterior [ver (4.28)], y se relaciona con la producción de entropía del proceso de carga, $\Sigma^{carga}(t_d)$, por medio de la fórmula (4.23), es decir,

$$\begin{aligned} \Sigma^{carga}(t_d) &= \Delta S_S^{carga}(t_d) + \Delta S_B^{carga}(t_d) + D \left(\text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d) \parallel \hat{\tau}_B \right) \\ &= \Delta S_S^{carga}(t_d) - \frac{Q^{carga}(t_d)}{T} \\ &\geq 0, \end{aligned} \quad (4.41)$$

donde $\Delta S_S^{carga}(t_d) = S(\text{Tr}_B \hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d)) - S(\hat{\rho}_S^p(t_d))$. En la Figura 4.17 se corrobora que $\Sigma^{carga}(t_d) \geq 0$ según los valores escogidos para los parámetros. El segundo sumando de la última igualdad en (4.38), que denominamos calor del proceso de desconexión, lo definimos como:

$$\begin{aligned} Q_d(t_d) &\equiv \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \text{Tr}_S \hat{\tau}_{\text{tot}} \right] - \text{Tr}_B \left[\hat{H}_B \text{Tr}_S \hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d) \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_B \sigma_{\hat{\rho}_B(0)} \right] - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{H}_B \sigma_{\hat{\rho}_B(t_d)} \right]; \end{aligned} \quad (4.42)$$

donde $\sigma_{\hat{\rho}_B(0)}$ es la MC del estado reducido del baño al inicio de la desconexión, $\hat{\rho}_B(0) \equiv \text{Tr}_S \hat{\tau}_{\text{tot}}$, y $\sigma_{\hat{\rho}_B(t_d)}$ es la MC del estado reducido del baño a tiempo t_d , $\hat{\rho}_B(t_d) \equiv \text{Tr}_S[\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d)]$. Dada la definición de calor del proceso de desconexión y ocupando la identidad (4.19) para \hat{H}_B , se obtiene que

$$-\frac{Q_d(t_d)}{T} = \Delta S_B^d(t_d) + D \left(\text{Tr}_S \left[\hat{U}_d(t_d) \hat{\tau}_{\text{tot}} \hat{U}_d^\dagger(t_d) \right] \parallel \hat{\tau}_B \right) - D \left(\text{Tr}_S \hat{\tau}_{\text{tot}} \parallel \hat{\tau}_B \right), \quad (4.43)$$

donde $\Delta S_B^d(t_d)$ es el cambio de entropía de von Neumann de los estados reducidos (final e inicial) del baño en el proceso de desconexión. $-Q_d(t_d)/T$ se relaciona con lo que en Riechers et al. [106] denominan como la producción de entropía,

$$\Sigma^{\text{RM}} \equiv \Delta \mathcal{I}_{\text{SUB}}(\hat{\rho}_S(t) : \hat{\rho}_B(t)) + \Delta D(\hat{\rho}_B(t) \parallel \hat{\tau}_B), \quad (4.44)$$

de un proceso unitario, $\hat{U}(\delta_t)$, que actúa sobre el estado de un sistema compuesto $S \cup B$ conformado por un sistema de interés S y un único baño B , y que está sujeto a un parámetro de control dependiente del tiempo, δ_t , del cual depende el Hamiltoniano del sistema compuesto. La condición inicial, $\hat{\rho}_{\text{tot}}(0)$, del sistema compuesto en el proceso $\hat{U}(\delta_t)$ puede o no tener

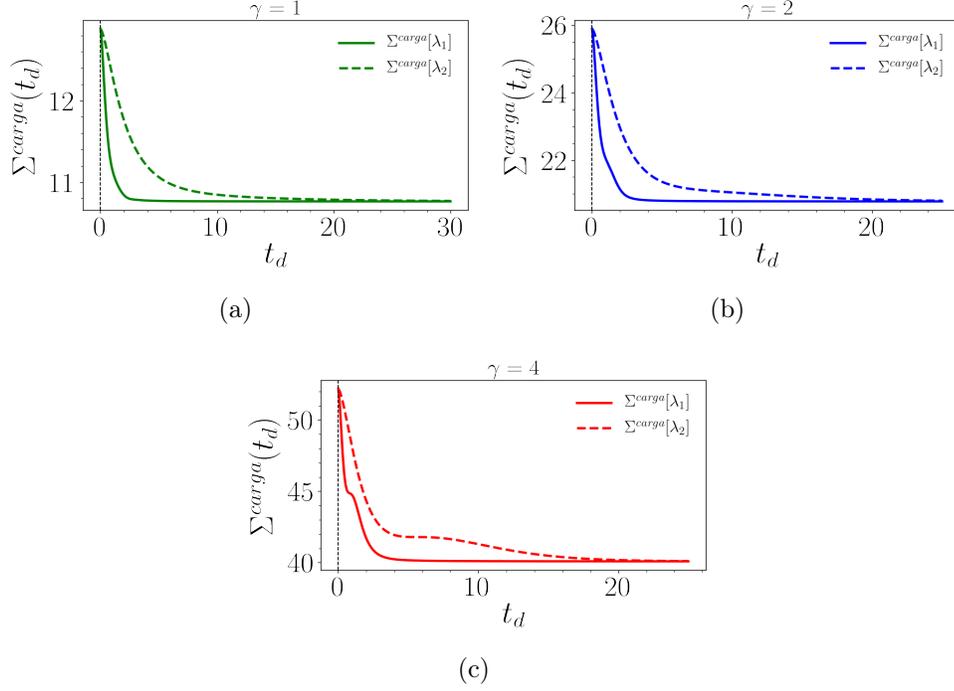


Figura 4.17: Σ^{carga} (4.41) en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

correlaciones. $\mathcal{I}_{SUB}(\hat{\rho}_S(t) : \hat{\rho}_B(t)) \equiv D(\hat{\rho}_{tot}(t) || \hat{\rho}_S(t) \otimes \hat{\rho}_B(t))$, $\hat{\rho}_{tot}(t) \equiv \hat{\mathcal{U}}(\delta_t)\hat{\rho}_{tot}(0)\hat{\mathcal{U}}^\dagger(\delta_t)$, $\hat{\rho}_S \equiv \text{Tr}_B[\hat{\rho}_{tot}(t)]$ y $\hat{\rho}_B(t) \equiv \text{Tr}_S[\hat{\rho}_{tot}(t)]$. Al aplicar la fórmula (4.44) al proceso de desconexión, obtenemos que la producción de entropía, $\Sigma^d(t_d)$, del proceso se expresa entonces por

$$\Sigma^d(t_d) = \Delta S_S^d(t_d) - \frac{Q_d(t_d)}{T}, \quad (4.45)$$

donde $\Delta S_S^d(t_d)$ es el cambio de entropía de von Neumann de los estados reducidos (final e inicial) de la batería en el proceso de desconexión. En principio, Σ^{RM} (4.44) podría ser una cantidad positiva o negativa dependiendo del proceso y/o de las correlaciones iniciales, no obstante, por lo que observamos en la Figura 4.18, $\Sigma^d(t_d)$ (4.45) parte en cero (que es el caso de desconexión con quench instantáneo) y luego es una cantidad negativa según los valores escogidos para los parámetros. Esto sería una violación de los enunciados clásicos de la segunda ley de la termodinámica, la cual se enuncia en el contexto de sistemas macroscópicos que interactúan débilmente [107, 108]. No obstante, es pertinente aclarar que la segunda ley en un ciclo es válida, pues al ser un ciclo un proceso disipativo, el trabajo disipado tiene que ser positivo, lo cual se observa en la Figura 4.16 para todos los casos estudiados. Definiendo $Q(t_d) \equiv Q^{carga}(t_d) + Q_d(t_d)$, vemos en la Figura 4.19; donde se compara $Q(t_d)$ con $-W_{\text{dis}}(t_d)$, que se corrobora la igualdad (4.38). Finalmente, en el límite termodinámico; donde se cumple de manera exacta que $W_{\text{dis}}(t_d) = -Q(t_d)$ según la igualdad (4.38) para el trabajo disipado, al sumar $\Sigma^{carga}(t_d)$ (4.41) y $\Sigma^d(t_d)$ (4.45) se obtiene una expresión cerrada para la producción

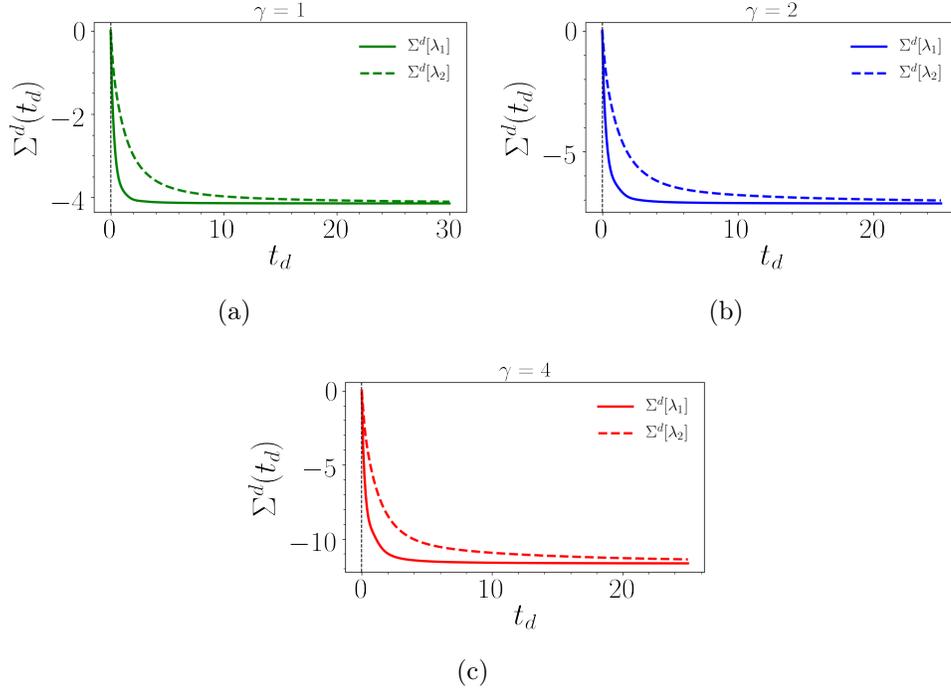


Figura 4.18: Σ^d (4.45) en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

de entropía de los ciclos, $\Sigma(t_d) = W_{\text{dis}}(t_d)/T$ [ver (2.25)]:

$$\begin{aligned}
\Sigma(t_d) &= -\frac{Q(t_d)}{T} \\
&= \Delta S_B^{\text{carga}}(t_d) + \Delta S_B^d(t_d) + D\left(\text{Tr}_S[\hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d)] \parallel \hat{\tau}_B\right) \\
&\quad + D\left(\text{Tr}_S\left[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)\right] \parallel \hat{\tau}_B\right) - D\left(\text{Tr}_S\hat{\tau}_{\text{tot}} \parallel \hat{\tau}_B\right),
\end{aligned} \tag{4.46}$$

donde en la primera igualdad se consideró que $\Delta S_S^d(t_d) = -\Delta S_S^{\text{carga}}(t_d)$, ya que $S(\hat{\rho}_S^p(t_d)) = S(\text{Tr}_B[\hat{U}_d(t_d)\hat{\tau}_{\text{tot}}\hat{U}_d^\dagger(t_d)])$ y $S(\text{Tr}_B[\hat{\Omega}_{\text{eq}}(t_d)]) = S(\text{Tr}_B\hat{\tau}_{\text{tot}})$. La expresión (4.46) solo depende de cantidades asociadas a la batería y al baño, y según lo demostrado en el Capítulo 2, se cumple que $\Sigma(t_d) \geq 0$, lo cual se corrobora en la Figura 4.16 donde se observa que $W_{\text{dis}}(t_d) \geq 0$ en los casos estudiados.

4.2.5. Eficiencia, $\eta(t_d)$

Para cada t_d la eficiencia por ciclo es

$$\eta(t_d) = \frac{\mathcal{W}(t_d)}{W_d(t_d) + W_c(t_d)}. \tag{4.47}$$

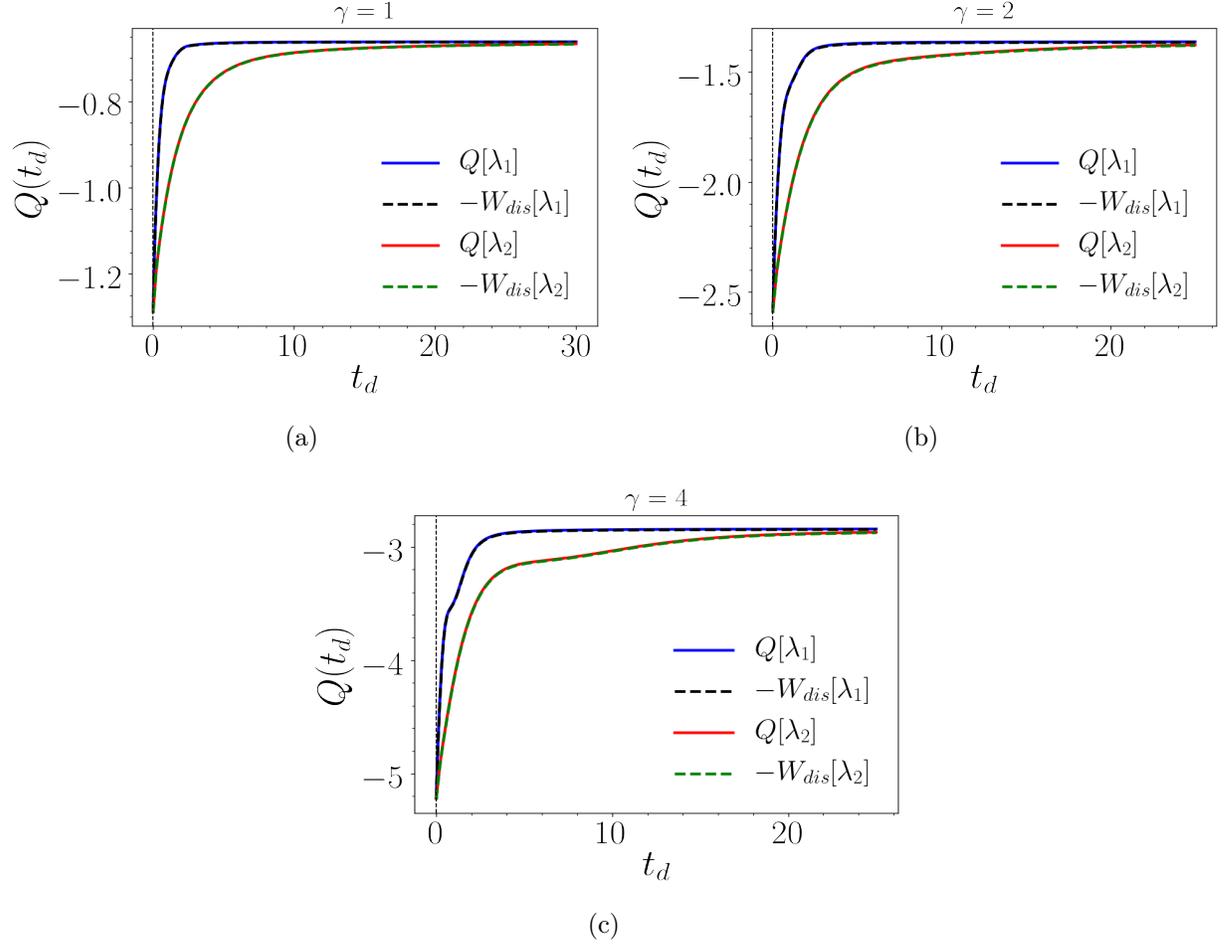


Figura 4.19: Calor en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas sólidas corresponden al valor de Q por ciclo calculado como la suma entre (4.39) y (4.42) para una desconexión con $\lambda_2(t)$ o $\lambda_1(t)$ según se especifica en la leyenda de la figura. Las curvas segmentadas corresponden al valor de $-W_{\text{dis}}$; con W_{dis} de la Figura (4.16). En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

De la Figura 4.20 se desprende que la eficiencia de los ciclos tiende a ser nula cuando los protocolos de desconexión poseen una duración suficiente tal de que el estado de la batería al final del proceso es $\hat{\rho}_S^{\text{tco}}$, es decir, cuando no es posible extraer ergotropía de la batería. También, como resultado importante, se observa que la eficiencia para ambos protocolos presenta un máximo que es mayor al valor de la eficiencia cuando la desconexión es instantánea (quench). El máximo de la eficiencia para el protocolo con λ_2 está a un tiempo t_d posterior que el máximo de la eficiencia para λ_1 . Destacamos que esto es un resultado importante, pues postula que si se desea que el ciclo de carga y descarga de la batería sea más eficiente, es óptimo escoger un ciclo con desconexión en un tiempo finito (tiempo del máximo de la eficiencia) que escoger un ciclo donde se desconecta por medio de un protocolo quench instantáneo, a la vez, es más óptimo ocupar un protocolo con λ_2 en un ciclo con desconexión a tiempo finito si se desea tener una eficiencia (y ergotropía) no nula para un rango mayor de tiempos t_d 's.

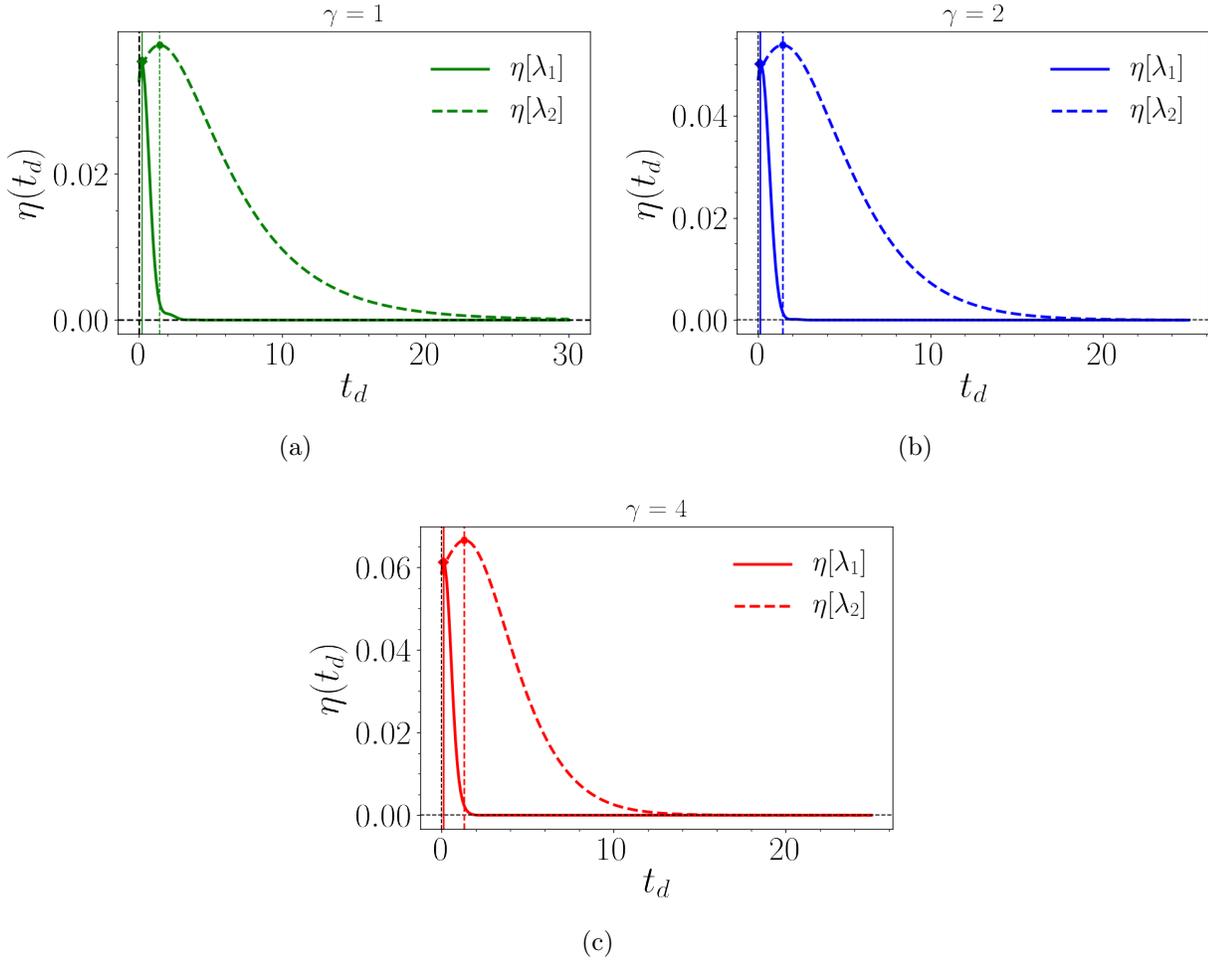


Figura 4.20: Eficiencia en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.

Conclusión

En esta tesis estudiamos ciclos termodinámicos en que se carga y descarga una batería cuántica. La batería es modelada por un oscilador armónico cuántico que interactúa linealmente con un baño (finito o infinito) formado por un conjunto de osciladores armónicos. Este modelo es el modelo de Caldeira-Leggett cuyo Hamiltoniano es cuadrático en los operadores canónicos. La forma del Hamiltoniano es apropiada si se quiere extender el presente estudio a campos cuánticos, como por ejemplo, los campos electromagnéticos en segunda cuantización. Abordamos el estudio con herramientas del formalismo simpléctico definido en un espacio de fase y a la vez con herramientas de la teoría de sistemas cuánticos abiertos definida en un espacio de Hilbert: ecuación de Langevin. La ventaja que nos brindó el tratamiento con formalismo simpléctico es la posibilidad de tratar la dinámica del sistema compuesto con cantidades finitas y la posibilidad de tener acceso tanto al estado de la batería como al estado del baño en cada instante de las ramas del ciclo, pues tuvimos acceso a las matrices de covarianza de ambos subsistemas en la evolución unitaria global en cada rama. Las matrices de covarianza de ambos subsistema caracterizan totalmente sus estados reducidos por ser estos estados Gaussianos con primeros momentos nulos. La Gaussianidad de ambos subsistemas en las distintas etapas de los ciclos estuvo garantizada por la Gaussianidad del estado inicial del sistema compuesto: estado térmico dependiente del Hamiltoniano de Caldeira-Leggett, y por las evoluciones unitarias Gaussianas de cada rama.

En el Capítulo 1 presentamos el formalismo simpléctico aplicado a estados Gaussianos. Este formalismo nos permitió mostrar que todo estado térmico dependiente de un Hamiltoniano cuadrático acotado inferiormente es un estado Gaussiano con primeros momentos nulos, además mostramos que la matriz de covarianza del estado térmico se puede generar a partir de su forma normal de Williamson y de la inversa de la transformación simpléctica que diagonaliza simplécticamente a la matriz Hamiltoniana. En el Capítulo 2 demostramos que un ciclo de la batería del tipo desconexión-extracción-conexión-carga con condición inicial térmica global satisface la segunda ley de la termodinámica en la forma de Kelvin-Planck, y en consecuencia se tiene que la eficiencia del ciclo está acotada por 1. En el Capítulo 3 resolvimos la ecuación de Langevin y obtuvimos expresiones explícitas para las entradas de la matriz de covarianza del estado estacionario de la batería en la evolución que corresponde al proceso de carga, para luego, ayudados por la teoría de respuesta lineal, demostrar que el estado estacionario es igual al estado Gibbsiano de fuerza media en el límite termodinámico, lo cual corroboramos numéricamente implementando la dinámica con las herramientas del formalismo simpléctico. Dada la elección del valor de N escogido, el uso de una densidad espectral con regularización de Lorentz-Drude y la elección de una muestra Lorentziana para el baño, pudimos corroborar y reproducir (aproximarnos) a las convergencias en el equilibrio

termodinámico. Estas convergencias fueron de gran interés pues describen el estado cargado de la batería cuando se escoge un valor de γ lo suficientemente alto, es decir, cuando la batería interactúa fuertemente con el baño. En la primera parte del capítulo 4 obtuvimos expresiones explícitas para los trabajos del ciclo cuando la desconexión y la conexión se efectúan con un protocolo quench instantáneo. A partir de los resultados numéricos observamos que los trabajos del ciclo en el límite termodinámico se ajustan mejor al caso en que el baño es modelado con una muestra de frecuencias Lorentziana en contraste a cuando se modela con una muestra de frecuencias homogénea, no obstante, cerrar el ciclo depende de la elección de la muestra de frecuencias a usar debido a la ocurrencia de las recurrencias de Poincaré cuando se interactúa con un baño finito. Los resultados importantes en esta parte, que dependen del valor escogido para los parámetros del modelo, son que la ergotropía disponible en la batería aumenta con el aumento de γ y el aumento de ω_D y disminuye con el aumento de la temperatura y el aumento de ω_0 . Por otra parte, la eficiencia presenta máximos en términos de γ y de ω_D , y en el caso particular con muestra Lorentziana observamos que el valor de ω_D en el cual la eficiencia presenta un máximo es el mismo en que el trabajo de desconexión presenta un mínimo negativo. Pudimos corroborar numéricamente que $W_{\text{dis}}^{\text{quench}} \geq 0$ y, relacionado a esto, encontramos una expresión explícita para la producción de entropía del proceso de carga, la cual es también la producción de entropía del ciclo. Esta expresión coincide con la fórmula de la producción de entropía reportada en Espósito et al. [63]. Demostramos analíticamente que $W_{\text{dis}}^{\text{quench}} = -Q^{\text{quench}}$ en el límite termodinámico, lo cual corroboramos numéricamente. En la segunda etapa del Capítulo 4 incorporamos un protocolo de desconexión dependiente del tiempo para dos parámetros adimensionales diferentes, los cuales modulan la interacción en el tiempo. Implementamos numéricamente la evolución de desconexión para distintos tiempos de duración, t_d , del protocolo y también implementamos los procesos de carga de la batería. Tomamos distintos valores de γ y los demás parámetros los mantuvimos fijos. Obtuvimos como resultado que independientemente del valor de γ , la ergotropía decae a cero para protocolos de desconexión que poseen t_d 's grandes, pero la eficiencia presenta un máximo para un protocolo de desconexión con un t_d determinado; este máximo es mayor que el valor de la eficiencia cuando el proceso de desconexión es un quench. Obtuvimos que $W_d(t_d)$ pasa a ser una cantidad negativa en la medida que t_d aumenta, lo cual implica extracción de trabajo en el proceso. Observamos que los trabajos presentan un comportamiento decreciente y asintótico en función de t_d , en analogía a los procesos cuasiestáticos. Corroboramos numéricamente que $W_{\text{dis}}(t_d) \geq 0$ y observamos que la máquina es más eficiente con protocolos de desconexión de duración t_d en que a la vez se disipa más trabajo en los regímenes de parámetros estudiados, dicho de otra manera, esta es una máquina que funciona fuera del equilibrio, pues en el equilibrio su eficiencia es nula. Como trabajo futuro sería interesante explorar otros regímenes de parámetros donde ocurra este mismo fenómeno: mayor eficiencia a mayor disipación, y más aún, demostrar si esto es válido independientemente del valor de los parámetros. Analíticamente demostramos que en el límite termodinámico $W_{\text{dis}}(t_d) = -Q(t_d)$ y encontramos una expresión explícita para la producción de entropía del ciclo en términos de la entropía de von Neumann y la entropía relativa de los estados del baño en el ciclo. Ayudados por las fórmulas de las producciones de entropía reportadas en Espósito et al. [63] y Riechers et al. [106], obtuvimos expresiones para $\Sigma^{\text{carga}}(t_d)$ y $\Sigma^{\text{d}}(t_d)$, donde la suma entre ambas es igual a la producción de entropía del ciclo. Observamos que $\Sigma^{\text{d}}(t_d)$ es una cantidad negativa para los casos estudiados, por lo que se contradice la segunda ley de la termodinámica clásica en el proceso de desconexión, no obstante, en la actualidad se han reportado distintos escenarios, teóricos y experimentales [105, 109, 110, 111], en que cuando la condición inicial

de un sistema global posee correlaciones puede existir un decrecimiento de la información mutua que redunde en una producción de entropía negativa de cierto proceso, no obstante, del punto de vista energético se ha demostrado que la cantidad de trabajo necesario para producir correlaciones siempre acota superiormente al trabajo que se puede extraer desde las mismas [112, 113, 114], lo cual es concordante con la segunda ley en su forma habitual. Las correlaciones cuánticas de un sistema, el trabajo que se puede extraer de estas en un proceso y la producción de entropía del mismo, son un campo activo de investigación y la posibilidad de enunciar una segunda ley que englobe todo tipo de procesos en sistemas cuánticos es una pregunta abierta. También es una pregunta abierta y activo foco de investigación descubrir definiciones adecuadas de calor y de trabajo que engloben los procesos termodinámicos cuánticos [7].

Bibliografía

- [1] Sadi Carnot. Reflections on the motive power of fire, and on machines fitted to develop that power. *Paris: Bachelier*, 108:1824, 1824.
- [2] Alexia Auffèves. Quantum technologies need a quantum energy initiative. *PRX Quantum*, 3(2):020101, 2022.
- [3] Jochen Gemmer, Mathias Michel, and Günter Mahler. *Quantum thermodynamics: Emergence of thermodynamic behavior within composite quantum systems*, volume 784. Springer, 2009.
- [4] Felix Binder, Luis Correa, Christian Gogolin, Janet Anders, and Gerardo Adesso. Thermodynamics in the quantum regime. *Fundamental Theories of Physics*, 195:1–2, 2018.
- [5] Sebastian Deffner and Steve Campbell. *Quantum Thermodynamics: An introduction to the thermodynamics of quantum information*. Morgan & Claypool Publishers, 2019.
- [6] Philipp Strasberg. *Quantum Stochastic Thermodynamics: Foundations and Selected Applications*. Oxford University Press, 2022.
- [7] Peter Talkner and Peter Hänggi. Colloquium: Statistical mechanics and thermodynamics at strong coupling: Quantum and classical. *Reviews of Modern Physics*, 92(4):041002, 2020.
- [8] Robert Alicki and Mark Fannes. Entanglement boost for extractable work from ensembles of quantum batteries. *Physical Review E*, 87(4):042123, 2013.
- [9] Dario Ferraro, Michele Campisi, Gian Marcello Andolina, Vittorio Pellegrini, and Marco Polini. High-power collective charging of a solid-state quantum battery. *Physical review letters*, 120(11):117702, 2018.
- [10] James Quach and William Munro. Using dark states to charge and stabilize open quantum batteries. *Physical Review Applied*, 14(2):024092, 2020.
- [11] Felipe Barra. Dissipative charging of a quantum battery. *Physical review letters*, 122(21):210601, 2019.
- [12] Karen Hovhannisyanyan, Felipe Barra, and Alberto Imparato. Charging assisted by thermalization. *Physical Review Research*, 2(3):033413, 2020.

- [13] Javier Carrasco, Jerónimo Maze, Carla Hermann-Avigliano, and Felipe Barra. Collective enhancement in dissipative quantum batteries. *Physical Review E*, 105(6):064119, 2022.
- [14] Felipe Barra, Karen Hovhannisyán, and Alberto Imparato. Quantum batteries at the verge of a phase transition. *New Journal of Physics*, 24(1):015003, 2022.
- [15] Sai Vinjanampathy and Janet Anders. Quantum thermodynamics. *Contemporary Physics*, 57(4):545–579, 2016.
- [16] Alessio Serafini, Matteo Paris, Fabrizio Illuminati, and Silvio De Siena. Quantifying decoherence in continuous variable systems. *Journal of Optics B: Quantum and Semi-classical Optics*, 7(4):R19, 2005.
- [17] Gerardo Adesso and Fabrizio Illuminati. Entanglement in continuous-variable systems: recent advances and current perspectives. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 40(28):7821, 2007.
- [18] Christian Weedbrook, Stefano Pirandola, Raúl García-Patrón, Nicolas Cerf, Timothy Ralph, Jeffrey Shapiro, and Seth Lloyd. Gaussian quantum information. *Reviews of Modern Physics*, 84(2):621, 2012.
- [19] Gerardo Adesso, Sammy Ragy, and Antony Lee. Continuous variable quantum information: Gaussian states and beyond. *Open Systems & Information Dynamics*, 21(01n02):1440001, 2014.
- [20] Hyukgun Kwon, Youngrong Lim, Liang Jiang, Hyunseok Jeong, and Changhun Oh. Quantum metrological power of continuous-variable quantum networks. *Physical Review Letters*, 128(18):180503, 2022.
- [21] Benjamin Yadin, Hyejung H Jee, Carlo Sparaciari, Gerardo Adesso, and Alessio Serafini. Catalytic gaussian thermal operations. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 55(32):325301, 2022.
- [22] Michael Reed and Barry Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics. IV Analysis of Operators*. Academic Press, New York, 1978.
- [23] Alessio Serafini. *Quantum continuous variables: a primer of theoretical methods*. CRC press, 2017.
- [24] Alessandro Ferraro, Stefano Olivares, and Matteo Paris. Gaussian states in continuous variable quantum information. *arXiv preprint quant-ph/0503237*, 2005.
- [25] Dan Marinescu. *Classical and quantum information*. Academic Press, 2011.
- [26] Maurice de Gosson. *Symplectic geometry and quantum mechanics*, volume 166. Springer Science & Business Media, 2006.
- [27] Stephen Barnett and Paul Radmore. *Methods in theoretical quantum optics*, volume 15. Oxford University Press, 2002.

- [28] Earle Kennard. Zur quantenmechanik einfacher bewegungstypen. *Zeitschrift für Physik*, 44(4):326–352, 1927.
- [29] Hermann Weyl. *The theory of groups and quantum mechanics*. Courier Corporation, 1950.
- [30] Marco Genoni, Ludovico Lami, and Alessio Serafini. Conditional and unconditional gaussian quantum dynamics. *Contemporary Physics*, 57(3):331–349, 2016.
- [31] Jonatan Bohr Brask. Gaussian states and operations—a quick reference. *arXiv preprint arXiv:2102.05748*, 2021.
- [32] Marlan Scully and Muhammad Zubairy. *Quantum optics*. American Association of Physics Teachers, 1999.
- [33] Christopher Gerry and Peter Knight. *Introductory quantum optics*. Cambridge university press, 2005.
- [34] Jacopo Surace and Luca Tagliacozzo. Fermionic gaussian states: an introduction to numerical approaches. *SciPost Physics Lecture Notes*, page 054, 2022.
- [35] Gianfranco Cariolaro, Roberto Corvaja, and Filippo Miatto. Gaussian states: Evaluation of the covariance matrix from the implementation with primitive component. *Symmetry*, 14(7):1286, 2022.
- [36] Alejandro Pozas-Kerstjens, Eric Brown, and Karen Hovhannisyan. A quantum otto engine with finite heat baths: Energy, correlations, and degradation. *New Journal of Physics*, 20(4):043034, 2018.
- [37] Stefano Olivares. Quantum optics in the phase space. *The European Physical Journal Special Topics*, 203(1):3–24, 2012.
- [38] Rajiah Simon, Subhash Chaturvedi, and V. Srinivasan. Congruences and canonical forms for a positive matrix: Application to the schweiner–wigner extremum principle. *Journal of Mathematical Physics*, 40(7):3632–3642, 1999.
- [39] Kalyanapuram Parthasarathy. The symmetry group of gaussian states. *Springer Proceedings in Mathematics and Statistics*, page 349, 2011.
- [40] Herbert Goldstein, Charles Poole, and John Safko. *Classical mechanics*. American Association of Physics Teachers, 2002.
- [41] Jun John Sakurai and Eugene Commins. *Modern quantum mechanics*, revised edition, 1995.
- [42] Nathan Myers, Obinna Abah, and Sebastian Deffner. Quantum thermodynamic devices: from theoretical proposals to experimental reality. *AVS Quantum Science*, 4(2):027101, 2022.
- [43] Arnab Ghosh, Victor Mukherjee, Wolfgang Niedenzu, and Gershon Kurizki. Are quantum thermodynamic machines better than their classical counterparts? *The European Physical Journal Special Topics*, 227(15):2043–2051, 2019.

- [44] Wiesław Pusz and Stanisław Woronowicz. Passive states and kms states for general quantum systems. *Communications in Mathematical Physics*, 58(3):273–290, 1978.
- [45] Andrew Lenard. Thermodynamical proof of the gibbs formula for elementary quantum systems. *Journal of Statistical Physics*, 19(6):575–586, 1978.
- [46] Herbert Callen. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*, 1998.
- [47] Armen Allahverdyan, Roger Balian, and Theodorus Nieuwenhuizen. Maximal work extraction from finite quantum systems. *EPL (Europhysics Letters)*, 67(4):565, 2004.
- [48] Paul Skrzypczyk, Ralph Silva, and Nicolas Brunner. Passivity, complete passivity, and virtual temperatures. *Physical Review E*, 91(5):052133, 2015.
- [49] Mark Mitchison, John Goold, and Javier Prior. Charging a quantum battery with linear feedback control. *Quantum*, 5:500, 2021.
- [50] Akram Touil, Barış Çakmak, and Sebastian Deffner. Ergotropy from quantum and classical correlations. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 55(2):025301, 2021.
- [51] Edwin Jaynes. Information theory and statistical mechanics. *Physical review*, 106(4):620, 1957.
- [52] Edwin Jaynes. Information theory and statistical mechanics. ii. *Physical review*, 108(2):171, 1957.
- [53] Nicolai Friis and Marcus Huber. Precision and work fluctuations in gaussian battery charging. *Quantum*, 2:61, 2018.
- [54] Eric Brown, Nicolai Friis, and Marcus Huber. Passivity and practical work extraction using gaussian operations. *New Journal of Physics*, 18(11):113028, 2016.
- [55] Heinz-Peter Breuer and Francesco Petruccione. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [56] Anton Trushechkin, Marco Merkli, James Cresser, and Janet Anders. Open quantum system dynamics and the mean force gibbs state. *AVS Quantum Science*, 4(1):012301, 2022.
- [57] Ronnie Kosloff. Quantum thermodynamics and open-systems modeling. *The Journal of chemical physics*, 150(20):204105, 2019.
- [58] Herbert Spohn and Joel Lebowitz. Irreversible thermodynamics for quantum systems weakly coupled to thermal reservoirs. *Adv. Chem. Phys.*, 38:109–142, 1978.
- [59] Yigit Subaşı, Christen Fleming, Jacob Taylor, and Bei Hu. Equilibrium states of open quantum systems in the strong coupling regime. *Physical Review E*, 86(6):061132, 2012.
- [60] Christian Gogolin and Jens Eisert. Equilibration, thermalisation, and the emergence of statistical mechanics in closed quantum systems. *Reports on Progress in Physics*, 79(5):056001, 2016.

- [61] Bruno Nachtergaele and Robert Sims. Lieb-robinson bounds in quantum many-body physics. *Contemp. Math*, 529:141–176, 2010.
- [62] Elliott Lieb and Derek Robinson. The finite group velocity of quantum spin systems. In *Statistical mechanics*, pages 425–431. Springer, 1972.
- [63] Massimiliano Esposito, Katja Lindenberg, and Christian Van den Broeck. Entropy production as correlation between system and reservoir. *New Journal of Physics*, 12(1):013013, 2010.
- [64] Göran Lindblad. Completely positive maps and entropy inequalities. *Communications in Mathematical Physics*, 40(2):147–151, 1975.
- [65] Enrico Fermi. *Thermodynamics*. Courier Corporation, 2012.
- [66] Alessandra Colla and Heinz-Peter Breuer. Entropy production and the role of correlations in quantum brownian motion. *Physical Review A*, 104(5):052408, 2021.
- [67] Ulrich Weiss. *Quantum dissipative systems*. World Scientific, 2012.
- [68] Amir Caldeira and Anthony Leggett. Quantum tunnelling in a dissipative system. *Annals of physics*, 149(2):374–456, 1983.
- [69] Rafael Benguria and Mark Kac. Quantum langevin equation. *Physical review letters*, 46(1):1, 1981.
- [70] Luis A Correa, Martí Perarnau-Llobet, Karen V Hovhannisyan, Senaida Hernández-Santana, Mohammad Mehboudi, and Anna Sanpera. Enhancement of low-temperature thermometry by strong coupling. *Physical Review A*, 96(6):062103, 2017.
- [71] George Ford and Mark Kac. On the quantum langevin equation. *Journal of statistical physics*, 46(5):803–810, 1987.
- [72] George Ford, John Lewis, and Robert O’Connell. Quantum langevin equation. *Physical Review A*, 37(11):4419, 1988.
- [73] Peter Hänggi and Gert-Ludwig Ingold. Fundamental aspects of quantum brownian motion. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 15(2):026105, 2005.
- [74] Peter Hänggi. Generalized langevin equations: A useful tool for the perplexed modeller of nonequilibrium fluctuations? In *Stochastic dynamics*, pages 15–22. Springer, 1997.
- [75] Abell Martha and Braselton James. *Introductory differential equations*, 2018.
- [76] Pawel Bialas, Jakub Spiechowicz, and Jerzy Luczka. Partition of energy for a dissipative quantum oscillator. *Scientific Reports*, 8(1):1–12, 2018.
- [77] Ivan Di Terlizzi, Felix Ritort, and Marco Baiesi. Explicit solution of the generalised langevin equation. *Journal of Statistical Physics*, 181(5):1609–1635, 2020.
- [78] P Chr Hemmer, LC Maximon, and H Wergeland. Recurrence time of a dynamical system. *Physical Review*, 111(3):689, 1958.

- [79] Peter Mazur and Elliott Montroll. Poincaré cycles, ergodicity, and irreversibility in assemblies of coupled harmonic oscillators. *Journal of mathematical physics*, 1(1):70–84, 1960.
- [80] Harry Nyquist. Thermal agitation of electric charge in conductors. *Physical review*, 32(1):110, 1928.
- [81] Herbert Callen and Theodore Welton. Irreversibility and generalized noise. *Physical Review*, 83(1):34, 1951.
- [82] L Reggiani, P Shiktorov, E Starikov, and V Gružinskis. Quantum fluctuation dissipation theorem revisited: remarks and contradictions. *Fluctuation and Noise Letters*, 11(03):1242002, 2012.
- [83] AV Bitsadze. Foundations of the theory of analytic functions of a complex variable. *Izdat. “Nauka”, Moscow*, 239, 1984.
- [84] Lev Davidovich Landau and Evgenii Mikhailovich Lifshitz. *Statistical Physics: Volume 5*, volume 5. Elsevier, 2013.
- [85] Bei Lok Hu, Juan Pablo Paz, and Yuhong Zhang. Quantum brownian motion in a general environment: Exact master equation with nonlocal dissipation and colored noise. *Physical Review D*, 45(8):2843, 1992.
- [86] Thomas Dittrich, Peter Hänggi, Gert-Ludwig Ingold, Bernhard Kramer, Gerd Schön, and Wilhelm Zwerger. *Quantum transport and dissipation*, volume 3. Wiley-Vch Weinheim, 1998.
- [87] Crispin Gardiner and Peter Zoller. *Quantum noise: a handbook of Markovian and non-Markovian quantum stochastic methods with applications to quantum optics*. Springer Science & Business Media, 2004.
- [88] Jens Eisert and Martin Plenio. Quantum and classical correlations in quantum brownian motion. *Physical review letters*, 89(13):137902, 2002.
- [89] Jonathan Halliwell and Ting Yu. Alternative derivation of the hu-paz-zhang master equation of quantum brownian motion. *Physical Review D*, 53(4):2012, 1996.
- [90] George Ford and Robert O’connell. Exact solution of the hu-paz-zhang master equation. *Physical Review D*, 64(10):105020, 2001.
- [91] Christen Fleming, Albert Roura, and Bei Hu. Exact analytical solutions to the master equation of quantum brownian motion for a general environment. *Annals of Physics*, 326(5):1207–1258, 2011.
- [92] Lorenzo Pucci, Massimiliano Esposito, and Luca Peliti. Entropy production in quantum brownian motion. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2013(04):P04005, 2013.
- [93] Inés De Vega and Daniel Alonso. Dynamics of non-markovian open quantum systems. *Reviews of Modern Physics*, 89(1):015001, 2017.

- [94] William Coffey, Yuri Kalmykov, Sergey Titov, and Bernard Mulligan. Wigner function approach to the quantum brownian motion of a particle in a potential. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 9(26):3361–3382, 2007.
- [95] D Des Cloizeaux. Linear response, generalized susceptibility and dispersion theory. In *Theory of condensed matter. Lectures presented at an international course*. 1968.
- [96] Ryogo Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12(6):570–586, 1957.
- [97] Hermann Grabert and Ulrich Weiss. Thermal enhancement of the quantum decay rate in a dissipative system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 56(2):171–183, 1984.
- [98] Pieter Ullersma. An exactly solvable model for brownian motion: I. derivation of the langevin equation. *Physica*, 32(1):27–55, 1966.
- [99] Martí Perarnau-Llobet, Henrik Wilming, Arnau Riera, Rodrigo Gallego, and Jens Eisert. Strong coupling corrections in quantum thermodynamics. *Physical review letters*, 120(12):120602, 2018.
- [100] Marcos Rigol. Breakdown of thermalization in finite one-dimensional systems. *Physical review letters*, 103(10):100403, 2009.
- [101] Eric Arrais, Diego Wisniacki, Augusto Roncaglia, and Fabricio Toscano. Work statistics for sudden quenches in interacting quantum many-body systems. *Physical Review E*, 100(5):052136, 2019.
- [102] Adalberto Varizi, Mariana Cipolla, Martí Perarnau-Llobet, Raphael Drumond, and Gabriel Landi. Contributions from populations and coherences in non-equilibrium entropy production. *New Journal of Physics*, 23(6):063027, 2021.
- [103] Gabriel Landi and Mauro Paternostro. Irreversible entropy production: From classical to quantum. *Reviews of Modern Physics*, 93(3):035008, 2021.
- [104] Michael Nielsen and Isaac Chuang. Quantum computation and quantum information, 2002.
- [105] Giuseppe Vitagliano, Claude Klöckl, Marcus Huber, and Nicolai Friis. Trade-off between work and correlations in quantum thermodynamics. In *Thermodynamics in the Quantum Regime*, pages 731–750. Springer, 2018.
- [106] Paul Riechers and Mile Gu. Initial-state dependence of thermodynamic dissipation for any quantum process. *Physical Review E*, 103(4):042145, 2021.
- [107] Ludwig Boltzmann. Weitere studien über das wärme Gleichgewicht unter gasmolekülen. In *Kinetische Theorie II*, pages 115–225. Springer, 1970.
- [108] Ludwig Boltzmann. “zu hrn. zermelos abhandlung über die mechanische erklärang irreversiler vorgänge” (on the mechanical explanation of irreversible processes). *Annalen der Physik*, 296(2):392–398, 1897.

- [109] Andrés Vallejo, Alejandro Romanelli, and Raúl Donangelo. Out-of-equilibrium quantum thermodynamics in the bloch sphere: Temperature and internal entropy production. *Physical Review E*, 101(4):042132, 2020.
- [110] Hossein Partovi. Entanglement versus stosszahlansatz: Disappearance of the thermodynamic arrow in a high-correlation environment. *Physical Review E*, 77(2):021110, 2008.
- [111] Kaonan Micadei, John Peterson, Alexandre Souza, Roberto Sarthour, Ivan Oliveira, Gabriel Landi, Tiago Batalhão, Roberto Serra, and Eric Lutz. Reversing the direction of heat flow using quantum correlations. *Nature communications*, 10(1):1–6, 2019.
- [112] George Ford and Robert O’Connell. A quantum violation of the second law? *Physical review letters*, 96(2):020402, 2006.
- [113] Ilki Kim and Günter Mahler. Quantum brownian motion and the second law of thermodynamics. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 54(3):405–414, 2006.
- [114] Ilki Kim and Günter Mahler. The second law of thermodynamics in the quantum brownian oscillator at an arbitrary temperature. *The european physical journal B*, 60(3):401–408, 2007.

Anexo A

Uso de las relaciones de Kramers-Kronig para la obtención de la expresión (3.46) y desarrollo del conmutador $[\hat{Q}_0(+\infty), \hat{P}_0(+\infty)]$ para obtener la identidad (3.48)

1. Relaciones de Kramers-Kronig:

Dada la función compleja $\alpha(\omega) \equiv \omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)$ se tiene que

$$\Re \left[\frac{1}{\alpha(\omega)} \right] = \frac{(\omega_0^2 - \omega^2) + \omega \Im[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2}$$

y

$$\Im \left[\frac{1}{\alpha(\omega)} \right] = \frac{\omega \Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2}.$$

Siempre que $\omega \Re[\tilde{\gamma}(\omega)]$ sea analítica en el semiplano superior complejo, entonces $1/\alpha(\omega)$ también lo es y por lo tanto la parte real de $1/\alpha(\omega)$ se relaciona con la parte imaginaria de $1/\alpha(\omega)$ por medio de las relaciones (fórmulas) de Kramers-Kronig [12]:

$$\begin{aligned} \Re \left[\frac{1}{\alpha(\omega)} \right] &= \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} d\omega' \frac{\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \Im \left[\frac{1}{\alpha(\omega')} \right] \\ &= \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} d\omega' \frac{\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \frac{\omega' \Re[\tilde{\gamma}(\omega')]}{|\alpha(\omega')|^2}, \end{aligned}$$

donde \mathcal{P} denota el valor principal de Cauchy. Tomando $\omega = 0$, la fórmula anterior implica que

$$\Re \left[\frac{1}{\alpha(0)} \right] = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} d\omega' \frac{\Re[\tilde{\gamma}(\omega')]}{|\alpha(\omega')|^2},$$

Luego, si

$$\int_0^{+\infty} d\omega' \frac{\Re[\tilde{\gamma}(\omega')]}{|\alpha(\omega')|^2}$$

es covergente, entonces

$$\mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{\Re[\tilde{\gamma}(\omega')]}{|\alpha(\omega')|} = \int_0^{+\infty} \frac{\Re[\tilde{\gamma}(\omega')]}{|\alpha(\omega')|}$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned} \Re \left[\frac{1}{\alpha(0)} \right] &= \frac{1}{\omega_0^2} \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\Re[\tilde{\gamma}(\omega)]}{|\alpha(\omega)|^2}. \end{aligned}$$

2. $[\hat{Q}_0(+\infty), \hat{P}_0(+\infty)]$:

Ocupando las expresiones (3.35) para las soluciones estacionarias de $\hat{Q}_0(+\infty)$ y $\hat{P}_0(+\infty)$ se tiene que

$$\begin{aligned} i\hbar &= [\hat{Q}_0(+\infty), \hat{P}_0(+\infty)] \\ &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_0^t dt' F(t') \int_0^t du G(u) [\hat{\xi}(t-t'), \hat{\xi}(t-u)] \\ &= \frac{2i\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \int_0^{+\infty} dt' \int_0^{+\infty} du F(t') G(u) \sin[\omega(t-u)] \\ &= \frac{2i\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \int_0^{+\infty} dt' \int_0^{+\infty} du F(t') G(u) \left(\frac{\exp[i\omega(u-t')] - \exp[-i\omega(u-t')]}{2i} \right) \\ &= \frac{m_0\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega \Re[\tilde{\gamma}(\omega)] \omega \left[\int_0^{+\infty} dt' F(t') \exp(-i\omega t') \int_0^{+\infty} du G(u) \exp(i\omega u) \right. \\ &\quad \left. - \int_0^{+\infty} dt' F(t') \exp(i\omega t') \int_0^{+\infty} du G(u) \exp(-i\omega u) \right] \\ &= \frac{m_0\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega \Re[\tilde{\gamma}(\omega)] \omega [\mathcal{L}\{F\}(-i\omega) \mathcal{L}\{G\}(i\omega) - \mathcal{L}\{F\}(i\omega) \mathcal{L}\{G\}(-i\omega)] \\ &= \frac{m_0\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega \Re[\tilde{\gamma}(\omega)] \omega \left[\frac{i\omega}{m_0|\alpha(\omega)|^2} + \frac{i\omega}{m_0|\alpha(\omega)|^2} \right] \\ &= \frac{2i\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\Re[\tilde{\gamma}(\omega)] \omega^2}{|\alpha(\omega)|^2}, \end{aligned} \tag{A.1}$$

donde se ocupó que

$$\begin{aligned} [\hat{\xi}(t-t'), \hat{\xi}(t-u)] &= \frac{2i\hbar}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} \sum_k \frac{g_k^2}{m_k \omega_k} \sin[\omega_k(u-t)] \right] \\ &= \frac{2i\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \sin[\omega(u-t)], \end{aligned}$$

las expresiones para las transformadas de Laplace de F y G (3.31), la segunda expresión en (3.41) que relaciona $J(\omega)$ con $\Re[\tilde{\gamma}(\omega)]$ y la continuación analítica entre las transformadas de Laplace y Fourier de una función. A partir de (A.1) es directo concluir que

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\Re[\tilde{\gamma}(\omega)] \omega^2}{|\alpha(\omega)|^2} = 1 \tag{A.2}$$

Anexo B

Deducción de la expresión (3.85) para $S(\tau)$

Considerando la fórmula de Kubo (3.81) para $\chi_{\hat{Q}_0\hat{Q}_0}$, la transformada de Fourier de $\chi_{\hat{Q}_0\hat{Q}_0}$ (suceptibilidad dinámica) y la expresión para la función correlación $A(\tau)$ en (3.84), vemos que

$$\begin{aligned}
 \Im[\tilde{\chi}(\omega)] &= \int_0^{+\infty} d\tau \chi(\tau) \sin(\omega\tau) \\
 &= -\frac{2}{\hbar} \int_0^{+\infty} d\tau \theta(\tau) A(\tau) \sin(\omega\tau) \\
 &= -\frac{2}{\hbar} \int_0^{+\infty} d\tau A(\tau) \frac{\exp(i\omega\tau) - \exp(-i\omega\tau)}{2i} \\
 &= \frac{i}{\hbar} \left[\int_0^{+\infty} d\tau A(\tau) \exp(i\omega\tau) - \int_0^{+\infty} d\tau A(\tau) \exp(-i\omega\tau) \right] \quad (\text{B.1}) \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau A(\tau) \exp(i\omega\tau) \\
 &= \frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau [C^+(\tau) - C^-(\tau)] \exp(i\omega\tau) \\
 &= \frac{1}{2\hbar} [\tilde{C}^+(\omega) - \tilde{C}^-(\omega)],
 \end{aligned}$$

donde $A(\tau) = -A(-\tau)$, $\tilde{C}^\pm(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau C^\pm(\tau) \exp(i\omega\tau)$ y $C^\pm(\tau)$ son las funciones de autocorrelación definidas en (3.83). Luego, dado que las correlaciones en el equilibrio térmico son invariantes ante traslaciones temporales [67], entonces se cumple que $C^-(\tau) = C^+(\tau - i\hbar\beta) \implies \tilde{C}^+(\omega) = \exp(-\omega\hbar\beta)\tilde{C}^+(\omega)$ y, por lo tanto, retomando la igualdad (B.1), se obtiene que

$$\Im[\tilde{\chi}(\omega)] = \frac{1}{2\hbar} \tilde{C}^+(\omega) [1 - \exp(-\beta\hbar\omega)]. \quad (\text{B.2})$$

Por otra parte, ocupando la expresión para la función correlación $S(\tau)$ en (3.84) y el resultado (B.2), vemos que

$$\begin{aligned}\tilde{S}(\omega) &= \frac{1}{2} [\tilde{C}^+(\omega) + \tilde{C}^-(\omega)] \\ &= \frac{1}{2} [1 + \exp(-\beta\hbar\omega)] \tilde{C}^+(\omega) \\ &= \hbar \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \Im[\tilde{\gamma}(\omega)];\end{aligned}$$

con $\tilde{S}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau S(\tau) \exp(i\omega\tau) = 2 \int_0^{+\infty} d\tau S(\tau) \cos(\omega\tau)$, pues $S(\tau) = S(-\tau)$. Finalmente, tomando la transformada de Fourier inversa de $\tilde{S}(\omega)$, se obtiene que

$$\begin{aligned}S(\tau) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{S}(\omega) \exp(-i\omega\tau) \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \Im[\tilde{\gamma}(\omega)] \cos\omega\tau.\end{aligned}\tag{B.3}$$

Anexo C

Implementación numérica de la evolución simpléctica $\mathbf{S}_d(t)$

Nuestro objetivo es aproximarlos numéricamente a la expresión exacta

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_d(t) &= \hat{\mathcal{T}} \exp \left[\int_0^t dt' 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(t') \right] \\ &\equiv 1 + \sum_{n=1}^{\infty} 2^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(t_1) \boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(t_2) \cdots \boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(t_n) \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

de la matriz de evolución simpléctica del proceso de desconexión. Para ello tomamos un intervalo temporal Δt tal que $t = (n + 1)\Delta t$ en n pasos temporales y $\Delta t \rightarrow 0$ en el límite continuo. Luego vemos que

$$\begin{aligned} \prod_{i=0}^n \exp [2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)\Delta t] &= \left[\mathbb{I} + 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(n\Delta t)\Delta t + \frac{(\Delta t)^2}{2} [2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(n\Delta t)]^2 + \cdots \right] \times \cdots \\ &\times \left[\mathbb{I} + 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(0)\Delta t + \frac{(\Delta t)^2}{2} [2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(0)]^2 + \cdots \right] \\ &= \mathbb{I} + \sum_{i=0}^n 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)\Delta t + \left[2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}[n\Delta t]\Delta t \sum_{i=0}^{n-1} 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)\Delta t + \right. \\ &2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}[(n-1)\Delta t]\Delta t \sum_{i=0}^{n-2} 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)\Delta t + \cdots + \\ &\left. 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}[\Delta t]\Delta t \sum_{i=0}^0 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)\Delta t \right] + \sum_{i=0}^n \frac{(\Delta t)^2}{2} [2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)]^2 + \cdots \\ &= \mathbb{I} + \sum_{i=0}^n 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)\Delta t + \sum_{i=0}^n 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)\Delta t \sum_{k=0}^i 2\boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(k\Delta t)\Delta t \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\Delta t}{2} \sum_{i=0}^n [2\mathbf{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)]^2 \Delta t + \dots \\
& \underbrace{\equiv}_{\Delta t \rightarrow 0} \mathbb{I} + \int_0^t dt_1 2\mathbf{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(t_1) + \int_0^t dt_1 2\mathbf{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 2\mathbf{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(t_2) + \dots,
\end{aligned} \tag{C.2}$$

por lo que numéricamente implementamos el proceso de desconexión como

$$\sigma_{\hat{\Omega}_{\text{tot}}(t_d)} = \mathbf{S}_d(t_d) \sigma_{\hat{\tau}_{\text{tot}}} [\mathbf{S}_d(t_d)]^T, \tag{C.3}$$

con

$$\mathbf{S}_d(t_d) \approx \prod_{i=0}^m \exp[2\mathbf{\Omega}\mathbf{H}_{\text{CL}}(i\Delta t)\Delta t]; \quad \text{donde } t_d = (m+1)\Delta t, \tag{C.4}$$

y procurando que Δt sea lo suficientemente pequeño para conseguir mayor exactitud. En la Figuras (C.1) y (C.2) se grafica la evolución en el proceso de desconexión (C.3) de la MC de la batería para dos tiempos de desconexión distintos, ocupando ambos protocolos de desconexión (λ_1 y λ_2) y escogiendo distintos valores para Δt . Se observa que a medida que disminuye Δt , las curvas se empiezan a superponer no viéndose diferencia aparente entre las evoluciones con $\Delta t \sim 10^{-4}$ y $\Delta t \sim 10^{-5}$ cuando $t_d = 0.5$ y tampoco se ve diferencia aparente entre las evoluciones con $\Delta t \sim 10^{-3}$ y $\Delta t \sim 10^{-4}$ cuando $t_d = 1.75$. Lo anterior nos muestra que para los valores de Δt mencionados la evolución de desconexión es una buena aproximación de la evolución de desconexión generada por la expresión exacta de $\mathbf{S}_d(t)$ [ver (C.1)] y por lo tanto se decide escoger $\Delta t \sim 10^{-4}$ para realizar todas las evoluciones de desconexión (con diferentes t_d) para las cuales se realizan los gráficos que están en función de t_d en la sección 4.2 del Capítulo 4. Por ejemplo, en la Figura (C.3), cada evolución simpléctica de desconexión para un t_d dado se realiza tomando $\Delta t \sim 10^{-4}$ en ambos protocolos (λ_1 y λ_2). En esta Figura se grafica la norma de Hilbert-Schmidt de la diferencia entre la MC del estado $\hat{\rho}_S(t_d)$ (estado de la batería al final de la desconexión) y la MC del estado $\hat{\rho}_S^{\text{tco}}$ (estado térmico de la batería con \hat{H}_S e inverso de la temperatura β) en función de t_d . Se observa que para tiempos t_d 's lo suficientemente grandes, la MC de la batería al final de la desconexión es la MC del estado $\hat{\rho}_S^{\text{tco}} \equiv \exp(-\beta\hat{H}_S)/\text{Tr}_S[\exp(-\beta\hat{H}_S)]$, reafirmandose lo dicho en las discusiones referidas a las Figuras (4.11) y (4.12).

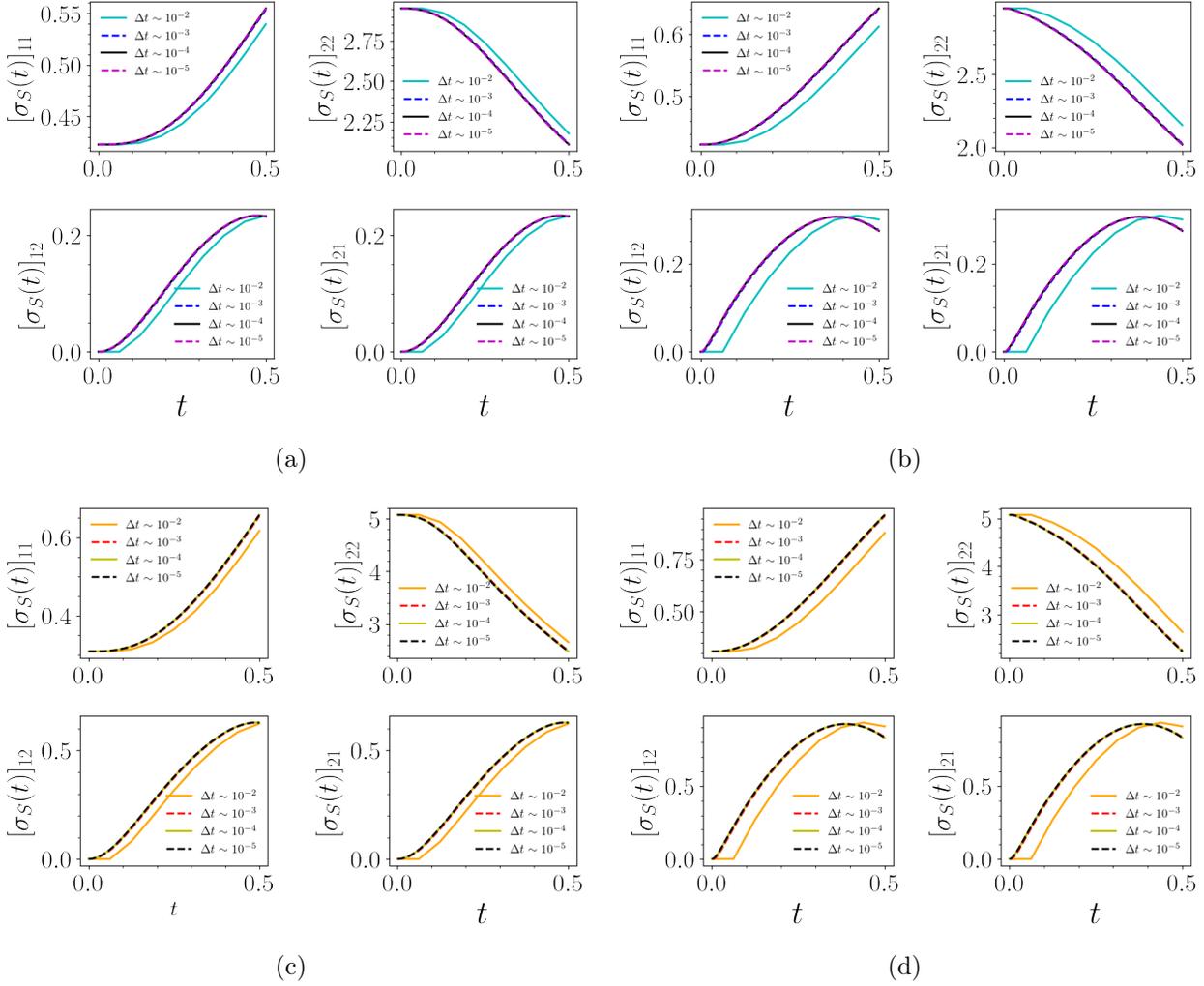


Figura C.1: Evolución de la MC de la batería en el proceso de desconexión con $t_d = 0.5$ para distintos valores de Δt . En (a) y (c) se escoge $\lambda_1(t)$. En (b) y (d) se escoge $\lambda_2(t)$. En (a) y (b) $\sigma_{\hat{\Omega}_{\text{tot}}(0)}$ y $\mathbf{H}_{\text{CL}}(0)$ se generan $\gamma = 1$. En (c) y (d) $\sigma_{\hat{\Omega}_{\text{tot}}(0)}$ y $\mathbf{H}_{\text{CL}}(0)$ se generan con $\gamma = 4$. En los cuatro paneles para las cantidades iniciales del proceso de desconexión se escoge la regularización de Lorentz-Drude, $\beta = 10$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$, $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$ y una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$.

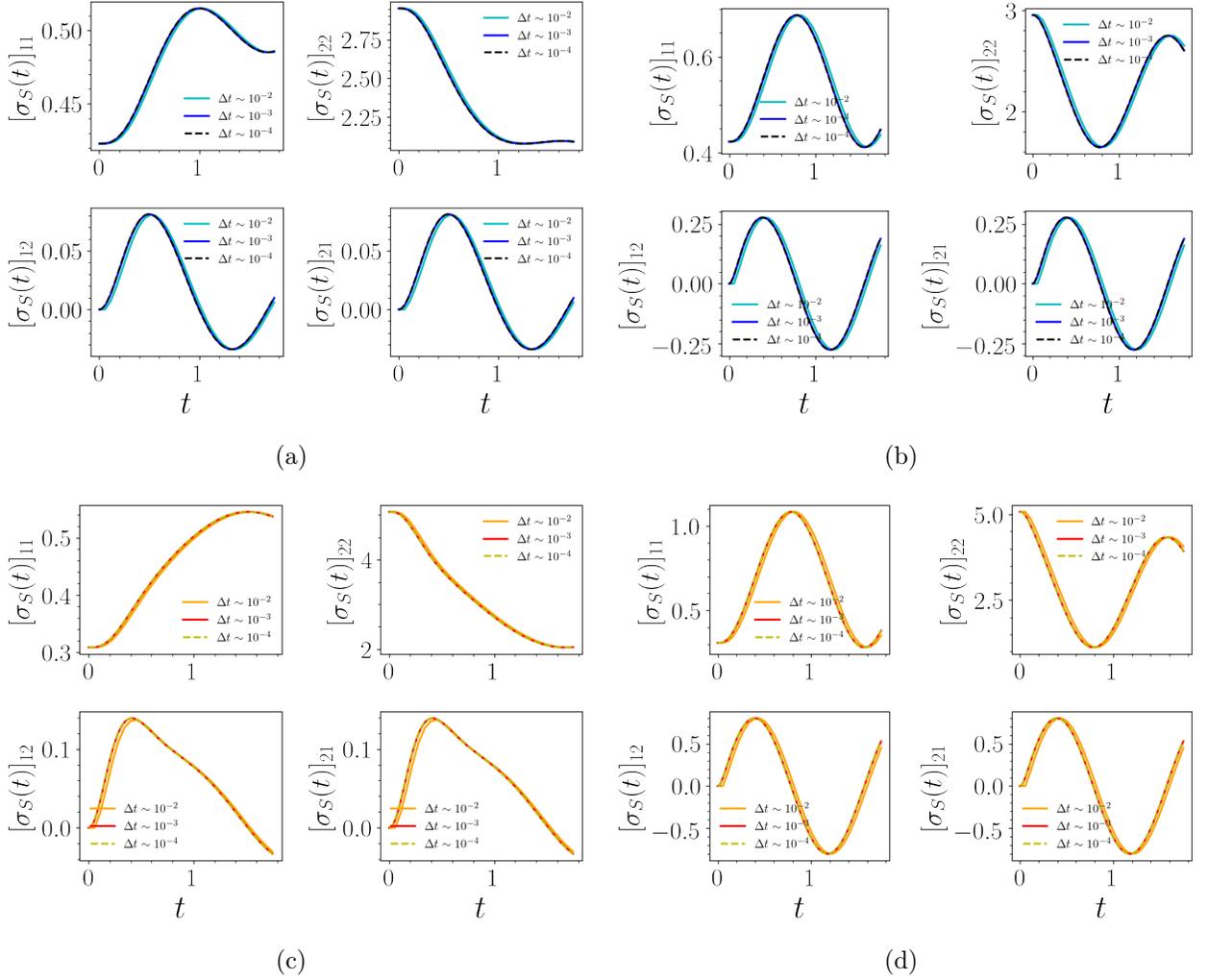


Figura C.2: Evolución de la MC de la batería en el proceso de desconexión con $t_d = 1.75$ para distintos valores de Δt . En (a) y (c) se escoge $\lambda_1(t)$. En (b) y (d) se escoge $\lambda_2(t)$. En (a) y (b) $\sigma_{\hat{\Omega}_{\text{tot}}(0)}$ y $\mathbf{H}_{\text{CL}}(0)$ se generan con $\gamma = 1$. En (c) y (d) $\sigma_{\hat{\Omega}_{\text{tot}}(0)}$ y $\mathbf{H}_{\text{CL}}(0)$ se generan con $\gamma = 4$. En los cuatro paneles se escoge para las cantidades iniciales del proceso de desconexión la regularización de Lorentz-Drude, $\beta = 10$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$, $\omega_0 = 2$, $\omega_D = 4$ y una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$.

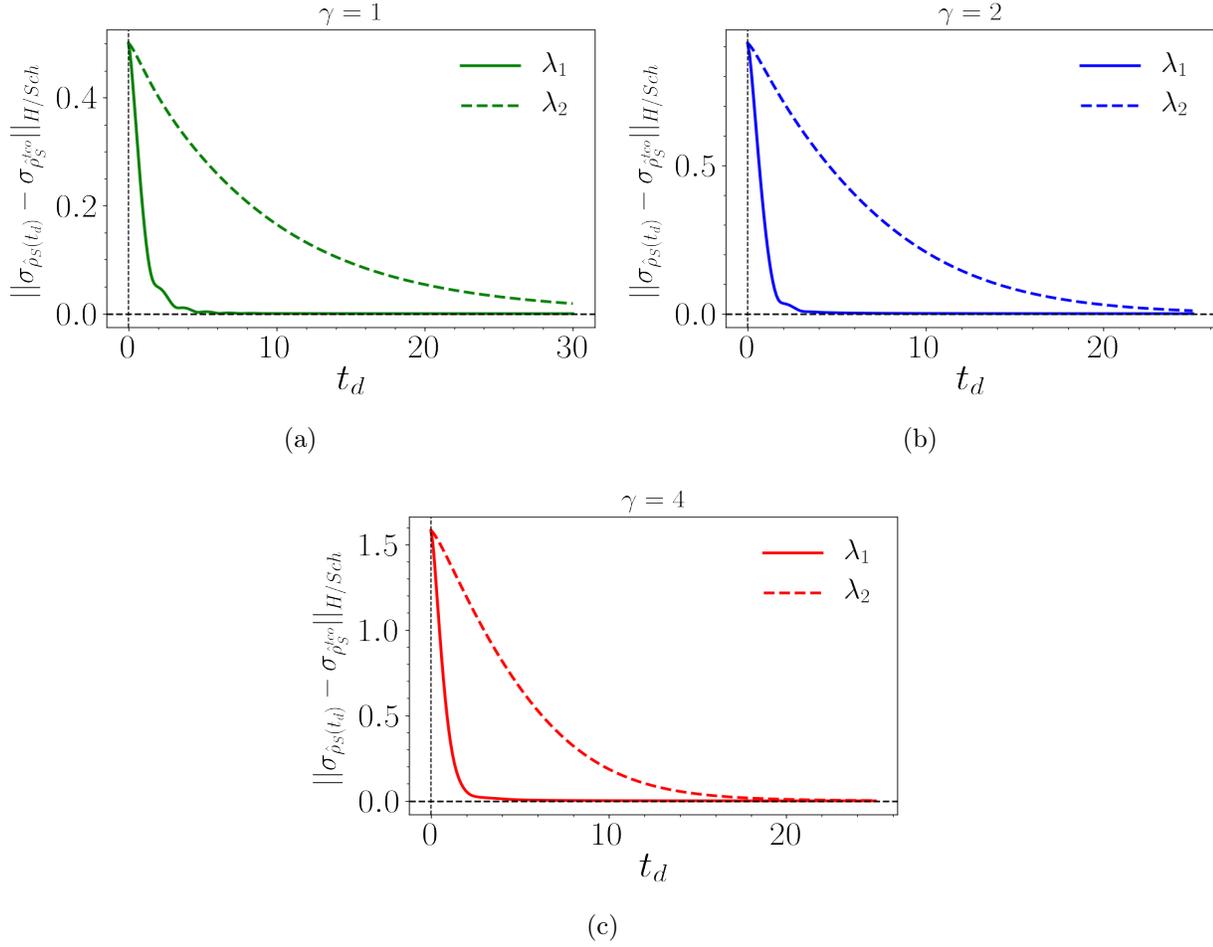


Figura C.3: Norma de Hilbert-Schmidt de la diferencia entre la MC del estado $\hat{\rho}_S(t_d)$ y la MC del estado $\hat{\rho}_S^{tco}$ en función de t_d para distintos valores de γ . Las curvas segmentadas corresponden a desconectar con $\lambda_2(t)$ y las curvas sólidas corresponden a desconectar con $\lambda_1(t)$ [ver (4.30)]. En los tres paneles se fijan los parámetros $\beta = 10$, $\omega_D = 4$, $\omega_0 = 2$, $m_0 = m_k = 1 \forall k$ y unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Se escoge una muestra Lorentziana de frecuencias con $a_0 = 1$, $\Delta_N = 7.72(\omega_N - \omega_{N-1})$ y $N = 150$. Se escoge la regularización de Lorentz-Drude para la generación de los g_k 's. Panel (a) $\gamma = 1$, panel (b) $\gamma = 2$ y panel (c) $\gamma = 4$.