



**UNIVERSIDAD  
DE ANTIOQUIA**  
1 8 0 3

# Dinámica de sistemas cuánticos abiertos fuera del equilibrio: Corriente y rectificación térmica

**Diana Melisa Domínguez Gómez**

Universidad de Antioquia  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Instituto de Física  
Medellín, Colombia  
2018



# Dinámica de sistemas cuánticos abiertos fuera del equilibrio: Corriente y rectificación térmica

Diana Melisa Domínguez Gómez

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:  
**Doctor en Física**

Directores:

Ph.D., Juliana Restrepo Cadavid  
Ph.D., Boris Anghelo Rodríguez Rey

Línea de Investigación:

Sistemas Cuánticos Abiertos

Grupo de Investigación:

Grupo de Física Atómica y Molecular

Universidad de Antioquia

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Instituto de Física

Medellín, Colombia

2018



## Dedicatoria

Después de estos 4 años de amistad y asesoría, quiero agradecerle inmensamente a mis directores. A Juliana, le doy muchísimas gracias por estos años en los que después de ser una compañera de trabajo en la UAN, se convirtió en mi guía, amiga y en algunas ocasiones consejera... Pocos podrán decir eso de su asesora, así que este crecimiento personal y profesional se debe directamente a ella. A Boris, muchas gracias por la paciencia y las dudas existenciales, este reto hizo que viera la física desde otra perspectiva... Una más estricta y bonita. Para los dos, mi más profunda admiración, respeto y gratitud por siempre.

A los amigos que hice en el transcurso del doctorado: Carlos Florez, Andrés Estrada, Germán Moreno y otros más. Muchas gracias por el café en la SIU, las dudas, la motivación y por supuesto ¡3 cordilleras! Hicieron que mi incursión en un terreno totalmente nuevo para mi fuese más ameno. A los amigos de siempre, los que escucharon las quejas: Hernán Muñoz, Milton Alvarado, Juan Carlos Rodríguez, Diego Patiño, Natalia Herrera. Gracias por la paciencia y por sacarme del encierro. A mi queridísima Tere, por tantos años de amistad que empezaron en la Unal, por los momentos de estudio y más aún por los relajos en Carlos E. A David Andrés Gómez mi BFF en la UAN, gracias por el café, las cediadas y las conspiraciones.

También quiero agradecer a las personas que estuvieron conmigo durante la pasantía doctoral en Poitiers-Francia: To Professor Karl Joulain, thank you for advising me during the internship, it was a very productive and important time for ending my PhD. Thanks for the patience and your kindness. To Antonio Mandarino and Prof. Bruno Bellomo in Besançon, thanks for the discussions. To the friends that I made in France: Armande, Kush, Suraju and Kamal. Thanks for the lunch and the cake time. A Lorena y Andrés, gracias por recibirme y estar pendiente, fue algo muy valioso para mi mientras estuve tan lejos de casa. Y gracias a mis amigos de antaño en Europa: Diego Fernández por uno de los paseos más locos que he tenido en mi vida... We are the fools of Bruges! Y Juliana Rivas, gracias por ese pequeño desatrase después de tantos años ¡verte fue una recarga de energía enorme!

A mi familia, por estar todos estos años de estudio, por entender y apoyar mis metas. Mis padres Helí y Edelmira por siempre tener las palabras correctas para levantarme el

ánimo. A mis hermanos Daniel, Camila y Carmen por manifestar siempre su preocupación. Nunca podré agradecerles lo suficiente por su amor incondicional. Esto es por y para ustedes! Finalmente y no menos importante, a Sebastián. Gracias no solo por su constante apoyo, si no también por la revisión de cada página en este documento. Esta tesis también es para él.

# Agradecimientos

El proyecto contó con la financiación de Colciencias para estudiantes de doctorado, a través del convenio pasantía N° 8702-505-2014, CPR14-338536. Financiación de la Universidad Antonio Nariño para Movilidad, a través del proyecto interno 20141031 y financiación del grupo COIMBRA mediante el programa de Becas para Profesores e Investigadores Jóvenes de Universidades Latinoamericanas 2017.





# Resumen

Los sistemas cuánticos abiertos han sido estudiados extensamente debido a que describen de forma más adecuada la realidad, asociando el entorno a los objetos cuánticos y haciéndolo participe de su dinámica. En este proyecto se estudiaron preguntas fundamentales de sistemas cuánticos abiertos por fuera del equilibrio, específicamente de un qubit o sistema de dos niveles acoplado a dos reservorios a diferentes temperaturas. Se estudió (i) cómo la naturaleza del reservorio, en particular la aplicación de un campo magnético, afecta la dinámica reducida del qubit, la corriente térmica entre dos reservorios y la rectificación térmica [1, 2, 3], (ii) como el acoplamiento en un subsistema más complejo puede afectar la corriente térmica y la rectificación explorando una configuración de transistor térmico. En ambas preguntas se consideraron técnicas markovianas para la dinámica reducida del qubit. El tema de sistemas cuánticos por fuera del equilibrio también tiene interés desde un punto de vista de aplicaciones tecnológicas relacionadas con la termodinámica cuántica, donde se busca lograr una alta rectificación del calor, factor fundamental para el diseño y construcción de diodos térmicos [4, 5, 6, 7]. En ambas configuraciones se encontró un factor de rectificación máximo acompañado de conductividad térmica diferencial negativa (NDTC por su sigla en inglés) por lo tanto, los dispositivos presentados en esta tesis son buenos candidatos a dispositivos termotrónicos, demostrando que la naturaleza de los reservorios y parámetros fácilmente controlables experimentalmente como campos magnéticos externos, aumentan la rectificación.

**Palabras clave:** Sistemas cuánticos abiertos, corriente térmica, rectificación, baños estructurados, dinámica por fuera del equilibrio, termotrónica.

# Abstract

Open quantum systems have been extensively studied because they describe reality in a more adequate way, associating the environment with quantum objects and making it participate in its dynamics. In this thesis, fundamental questions of open quantum systems out of equilibrium were studied, specifically a qubit or two-level system coupled to two reservoirs at different temperatures. We studied (i) how the nature of the reservoir, in particular the application of a magnetic field, affects the reduced dynamics of the qubit and the thermal current between two reservoirs [1, 2, 3], (ii) how the coupling in a more complex subsystem can affect the thermal current and rectification and the use of those results to build a thermal transistor configuration. In both questions, Markovian technics were considered for the reduced dynamics of qubit. The issue of quantum systems out of equilibrium also has interest from a point of view of technological applications related to quantum thermodynamics, where a high rectification of heat is sought, a fundamental factor for the design and construction of thermal diodes [4, 5, 6, 7]. In both configurations a maximum rectification factor was found, accompanied by NDTC. Therefore the devices presented in this thesis are good candidates for thermotronic devices, demonstrating that the nature of the reservoirs and easily controllable parameters can indeed increase the rectification.

**Keywords:** Open quantum systems, thermal current, rectification, structured baths, out of equilibrium dynamics, termotronic.

# Contenido

<b>Agradecimientos</b>	<b>VII</b>
<b>Resumen</b>	<b>IX</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>XIII</b>
<b>Introducción</b>	<b>2</b>
<b>1. Marco de Referencia</b>	<b>5</b>
1.1. Sistemas cuánticos abiertos . . . . .	6
1.1.1. Dinámica de los sistemas cuánticos abiertos . . . . .	8
1.1.2. Ecuación Maestra de Born-Markov . . . . .	9
1.1.3. Ecuación maestra en la forma de Lindblad . . . . .	10
1.1.4. Ecuación maestra de Pauli . . . . .	12
1.2. Modelo de Interacción subsistema-reservorio . . . . .	13
1.2.1. Sistemas de dos niveles (TLS) o Qubits . . . . .	13
1.2.2. Modelos de Interacción espín-reservorio . . . . .	15
1.3. Corriente térmica . . . . .	17
1.3.1. Transporte de energía: Calor y trabajo . . . . .	17
1.3.2. Corriente desde el operador flujo de calor . . . . .	18
1.3.3. Corriente para sistemas de varios qubits acoplados a baños térmicos .	20
1.4. Dispositivos en Termotrónica . . . . .	22
1.4.1. El Diodo Térmico . . . . .	22
1.4.2. El transistor térmico . . . . .	23
<b>2. Corriente térmica en un sistema de dos niveles y dos reservorios</b>	<b>25</b>
2.1. Modelo . . . . .	27
2.2. Tasas de Transición de Probabilidad . . . . .	33
2.2.1. Baño Aislante . . . . .	34
2.2.2. Baño Metálico . . . . .	38
2.3. Configuración Aislante-Aislante . . . . .	43
2.3.1. Corriente . . . . .	43
2.3.2. Rectificación . . . . .	46

2.4.	Configuración Metal-Metal . . . . .	49
2.4.1.	Corriente . . . . .	49
2.4.2.	Rectificación y NDTC . . . . .	52
2.5.	Configuración Aislante-Metal . . . . .	54
2.5.1.	Corriente cuando el campo Zeeman es aplicado en el metal . . . . .	55
2.5.2.	Corriente cuando el campo Zeeman es aplicado en el aislante . . . . .	59
2.6.	Conclusiones y perspectivas . . . . .	64
<b>3.</b>	<b>Corriente térmica en sistemas de dos niveles que interactúan entre sí</b>	<b>66</b>
3.1.	Modelo . . . . .	67
3.2.	El diodo térmico . . . . .	68
3.2.1.	Dinámica asintótica . . . . .	69
3.2.2.	Tasas de transición de Probabilidad . . . . .	71
3.2.3.	Corriente y Rectificación . . . . .	81
3.3.	El transistor térmico . . . . .	88
3.3.1.	Dinámica asintótica . . . . .	90
3.3.2.	Tasas de Transición de Probabilidad . . . . .	90
3.3.3.	Corriente y Amplificación térmica . . . . .	92
3.4.	Conclusiones y perspectivas . . . . .	93
<b>A.</b>	<b>Anexo: Autoenergías</b>	<b>95</b>
<b>B.</b>	<b>Anexo: Coeficientes Diodo Térmico DM</b>	<b>98</b>
<b>C.</b>	<b>Anexo: Coeficientes Transistor Térmico DM</b>	<b>99</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>103</b>

# Lista de Figuras

<b>1-1.</b>	Diagrama esquemático de la interacción entre un sistema cuántico $S$ y un reservorio $B$ que componen un sistema abierto. . . . .	7
<b>1-2.</b>	Diagrama esquemático de un bit clásico y un bit cuántico o qubit. Los estados de un bit clásico son mutuamente excluyentes, mientras que los estados de un qubit son una superposición de los posibles estados en los cuales se puede encontrar el sistema. . . . .	14
<b>1-3.</b>	Diagrama esquemático de un diodo térmico. La idea fundamental en este tipo de dispositivos es la misma que se tiene en los diodos electrónicos, permitir el flujo de energía en una dirección y bloquearlo totalmente en el sentido contrario. . . . .	22
<b>1-4.</b>	Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración 2 qubit y dos reservorios . . . . .	23
<b>2-1.</b>	Realización experimental de un diodo térmico híbrido. Tomado de [8] . . . . .	26
<b>2-2.</b>	Diagrama esquemático del sistema estudiado, donde $\eta_\nu$ es la fuerza de acoplamiento entre cada baño y el subsistema. $J_+$ define el sentido positivo del flujo de energía del baño $L$ al $R$ y $H$ es el campo magnético aplicado en el baño derecho. . . . .	27
<b>2-3.</b>	Ejemplo de la estructura de bandas reales para un semiconductor y modelos de densidad de estados. La figura (a) Estructura de bandas para el InAs, tomado de [9] y la figura (b) Densidades de estados $\rho_{un}$ , $\rho_{el}$ , $\rho_{sq}$ como una función de la energía $E$ , si $\mu > \Delta$ se trata de un metal y si $\mu < \Delta$ es un aislante. . . . .	31
<b>2-4.</b>	Diagrama esquemático de los pasos a seguir para el análisis de cada dispositivo . . . . .	33
<b>2-5.</b>	Tasas de transición de probabilidad para un baño aislante cuando se aplica un campo Zeeman, cada curva representa la tasa a un campo $H$ diferente. La figura (a) muestra la tasa de transición a medida que aumenta la frecuencia característica $h$ (en unidades de $\Lambda$ ) del qubit a $T = 0\Lambda$ . La figura (b) muestra el comportamiento completo de la tasa de transición de probabilidad en función de $h$ $T = 0\Lambda$ . La figura (c) muestra la tasa de transición de probabilidad para tres diferentes temperaturas, se observa que al aumentar la temperatura $\gamma \neq 0$ cuando $h = 0$ , gracias a la activación térmica. Condiciones: $\Delta = 0.1\Lambda$ , $T = 0\Lambda$ , $\Lambda = 1\text{eV}$ . . . . .	35

- 2-6.** Tasa de transición a medida que incrementa la temperatura (en unidades de  $\Lambda$ ) del reservorio aislante. Cada curva representa la tasa a un campo  $H$  diferente. La figura (a) muestra la tasa de transición de probabilidad en el intervalo  $[0, 0.04\Lambda]$  para el intervalo  $H \leq \Delta$  mientras que la figura (b) muestra el comportamiento en este mismo intervalo para la tasa con  $H > \Delta$ . La figura (c) muestra el comportamiento a altas temperaturas de las tasas, donde se puede observar su comportamiento asintótico. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1eV$  . . . 37
- 2-7.** Tasas de transición de probabilidad para un baño metálico cuando se aplica un campo Zeeman, cada curva representa la tasa a un campo  $H$  diferente. La figura (a) muestra la tasa de transición a medida que aumenta la frecuencia característica  $h$  (en unidades de  $\Lambda$ ) del qubit a  $T = 0\Lambda$ . La figura (b) muestra el comportamiento completo de la tasa de transición de probabilidad en función de  $h$  para dos campos  $H$  distintos. La figura (c) muestra la tasa de transición de probabilidad para tres diferentes temperaturas, se observa que al aumentar la temperatura  $\gamma \neq 0$  cuando  $h = 0$ , gracias a la activación térmica. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $T = 0\Lambda$ ,  $\Lambda = 1eV$  . . . . . 39
- 2-8.** Tasa de transición a medida que incrementa la temperatura (en unidades de  $\Lambda$ ) del reservorio metálico. Cada curva representa la tasa a un campo  $H$  diferente. La figura (a) muestra la tasa de transición de probabilidad en el intervalo  $[0, 0.04\Lambda]$  para todos los campos aplicados, mientras que la figura (b) muestra el comportamiento a altas temperaturas de las tasas, donde se puede observar su comportamiento asintótico. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1eV$  . . . . . 41
- 2-9.** Cambio de la corriente  $J_L^\pm$  al medida que aumenta la diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los reservorios y sus respectivas tasas de transición para una configuración aislante-aislante, cada curva representa un campo  $H$  distinto. La figura (a) muestra la corriente en ambas direcciones  $J^+$  y  $J^-$ , en este caso,  $\Delta T > 0$  corresponde a  $J^+$  y  $\Delta T < 0$  a  $J^-$ . La figura (b) muestra las tasas de transición usadas para el cálculo de la corriente  $J^-$  y la figura (c) las tasas usadas para la corriente  $J^+$ . Para estos gráficos, cada corriente se analiza comparando la tasa para el baño  $L$  con la tasa para cada campo en el baño  $R$ . Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1eV$  . . . . . 44
- 2-10.** Diagrama esquemático del cálculo de la rectificación en la configuración qubit-dos reservorios cuando los baños son aislantes y es aplicado un campo Zeeman en el baño derecho. . . 46
- 2-11.** Rectificación y corriente en función de la diferencia de temperaturas entre los baños  $\Delta T$  para diferentes valores de  $H$  en una configuración aislante-aislante. La figura (a) muestra la rectificación y la figura (b) muestra la corriente  $J^+$  y  $J^-$  en función de la diferencia de temperaturas. Condiciones  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $\Lambda = 1eV$  . . . . . 47
- 2-12.** Mapa de calor para la rectificación en función de  $\Delta T$  y  $H$ . La curva negra y la roja representan los intervalos con NDTC y son graficadas en el valor absoluto de  $|\Delta T|$  para visualizar su acción en la rectificación. . . . . 48

<p><b>2-13.</b>Cambio de la corriente <math>J_L^\pm</math> al medida que aumenta la diferencia de temperatura <math>\Delta T</math> entre los reservorios y sus respectivas tasas de transición, cada curva representa un campo <math>H</math> distinto. La figura (a) muestra la corriente en ambas direcciones <math>J^+</math> y <math>J^-</math>, en este caso, <math>\Delta T &gt; 0</math> corresponde a <math>J^+</math> y <math>\Delta T &lt; 0</math> a <math>J^-</math>. La figura (b) muestra las tasas de transición usadas para el cálculo de la corriente <math>J^-</math> y la figura (c) las tasas usadas para la corriente <math>J^+</math>. Para estos gráficos, cada corriente se analiza comparando la tasa para el baño <math>L</math> con la tasa para cada campo en el baño <math>R</math>. Condiciones: <math>\Delta = 0.1\Lambda</math>, <math>h = 10^{-3}\Lambda</math>, <math>\Lambda = 1\text{eV}</math>. . .</p>	<p>50</p>
<p><b>2-14.</b>Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración un qubit y dos reservorios metálicos con potencial químico <math>\mu = 0.18\Lambda</math>. . . . .</p>	<p>52</p>
<p><b>2-15.</b>Rectificación y corriente en función de la diferencia de temperaturas entre los baños <math>\Delta T</math> para diferentes valores de <math>H</math> en una configuración metal-metal. La figura (a) muestra la rectificación y la figura (b) muestra la corriente <math>J^+</math> y <math>J^-</math> en función de la diferencia de temperaturas. Condiciones: <math>\Delta = 0.1\Lambda</math>, <math>h = 10^{-3}\Lambda</math>, <math>\Lambda = 1\text{eV}</math> . . . . .</p>	<p>53</p>
<p><b>2-16.</b>Mapa de rectificación en función de <math>\Delta T</math> y <math>H</math>. En este caso no se observa NDTC en la corriente.</p>	<p>54</p>
<p><b>2-17.</b>Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración un qubit y dos reservorios. En este caso el baño izquierdo es aislante y el baño derecho es metálico con campo externo aplicado. . . . .</p>	<p>55</p>
<p><b>2-18.</b>Cambio de la corriente <math>J_L^\pm</math> al medida que aumenta la diferencia de temperatura <math>\Delta T</math> entre los reservorios y sus respectivas tasas de transición, cada curva representa un campo <math>H</math> distinto. La figura (a) muestra la corriente en ambas direcciones <math>J^+</math> y <math>J^-</math>, en este caso, <math>\Delta T &gt; 0</math> corresponde a <math>J^+</math> y <math>\Delta T &lt; 0</math> a <math>J^-</math>. En (b) se muestran las Tasas de transición en los baños <math>L</math> y <math>R</math> para la corriente <math>J^-</math> y en (c) las tasas de transición de probabilidad para <math>J^+</math>. Las tasas de transición para <math>L</math> en ambos casos son tres órdenes de magnitud menores que las tasas en <math>R</math> . . . . .</p>	<p>56</p>
<p><b>2-19.</b>Rectificación y corriente en función de la diferencia de temperaturas entre los baños <math>\Delta T</math> para diferentes valores de <math>H</math> en una configuración aislante-metal cuando se aplica campo en el reservorio derecho. La figura (a) muestra la rectificación y la figura (b) muestra la corriente <math>J^+</math> y <math>J^-</math> en función de la diferencia de temperaturas. Solo se observa una de las curvas dado que todas ellas se encuentran superpuestas. Condiciones: <math>\Delta = 0.1\Lambda</math>, <math>h = 10^{-3}\Lambda</math>, <math>\Lambda = 1\text{eV}</math> . . . . .</p>	<p>57</p>
<p><b>2-20.</b>Mapa de calor para la rectificación en función de <math>\Delta T</math> y <math>H</math>. En este caso, hay NDTC para todo el intervalo de temperatura. . . . .</p>	<p>58</p>
<p><b>2-21.</b>Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración un qubit y dos reservorios. En este caso el baño derecho es metálico y el baño izquierdo es aislante con campo externo aplicado. . . . .</p>	<p>59</p>

- 2-22.** Cambio de la corriente  $J_L^\pm$  al medida que aumenta la diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los reservorios y sus respectivas tasas de transición, cada curva representa un campo  $H$  distinto. La figura (a) muestra la corriente en ambas direcciones  $J^+$  y  $J^-$ , en este caso,  $\Delta T > 0$  corresponde a  $J^+$  y  $\Delta T < 0$  a  $J^-$ . En (b) se muestran las Tasas de transición en los baños  $L$  y  $R$  para la corriente  $J^-$  y en (c) las tasas de transición de probabilidad para  $J^+$ . Las tasas de transición para  $L$  en ambos casos son tres órdenes de magnitud menores que las tasas en  $R$  . . . . . 60
- 2-23.** Rectificación y corriente en función de la diferencia de temperaturas entre los baños  $\Delta T$  para diferentes valores de  $H$  en una configuración aislante-metal cuando el campo está aplicado en el reservorio izquierdo. La figura (a) muestra la rectificación y la figura (b) muestra la corriente  $J^+$  y  $J^-$  en función de la diferencia de temperaturas. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$  . . . . . 61
- 2-24.** Mapa de rectificación en función de  $\Delta T$  y  $H$ . . . . . 62
- 3-1.** Diagrama esquemático de un diodo térmico compuesto por dos qubits de frecuencia  $\omega_p$  que interactúan con una intensidad de acoplamiento  $\eta$ . Cada qubit está acoplado a un reservorio con diferente temperatura. . . . . 67
- 3-2.** Tasa de transición en reservorio izquierdo  $L$  cuando se incrementa la temperatura del baño, con  $T_L > T_R$ . La figura (a) muestra las tasas de transición  $\gamma_{2-1}$  y  $\gamma_{4-3}$ , mientras que  $\gamma_{3-1}$  y  $\gamma_{4-2}$  en la figura (b). Las condiciones para el sistema en este caso son  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ . . . . . 72
- 3-3.** Tasa de transición en el reservorio derecho  $R$  cuando se incrementa la temperatura del baño izquierdo, con  $T_L > T_R$ . En la figura (a) se grafica  $\gamma_{2-1}^R$  y  $\gamma_{4-3}^R$  y en la (b)  $\gamma_{3-1}^R$  y  $\gamma_{4-2}^R$ . Condiciones:  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ . . . . . 73
- 3-4.** Tasa de transición en el reservorio  $L$  cuando se incrementa la temperatura del baño derecho  $R$  expresada en la ecuación 3-11, con  $T_R > T_L$ . En la figura (a) se dibujan las tasas de transición  $\gamma_{2-1}^L$ ,  $\gamma_{3-1}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$ , mientras que la figura (b) muestra la tasa de transición  $\gamma_{4-3}^L$ . Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_L = 10^{-3}$ . . . . . 74
- 3-5.** Tasa de transición en los reservorios cuando se incrementa la temperatura del baño derecho  $R$  expresada en la ecuación 3-11, con  $T_R > T_L$ . En la figura (a) se trazan las tasas de transición  $\gamma_{2-1}$  y  $\gamma_{4-3}$  en el baño izquierdo, la figura (b) muestra las tasas de transición  $\gamma_{2-1}$  y  $\gamma_{4-3}$  para el baño derecho. Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_L = 10^{-3}$ . . . . . 75
- 3-6.** Mapa de calor para las tasas de transición de probabilidad  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{2-1}^R$  cuando se incrementa la fuerza del acoplamiento DM, cuando  $T_L > T_R$ . En la figura (a) muestra la tasa de transición  $\gamma_{2-1}^L$  en el baño izquierdo y la figura (b) muestra la tasa de transición  $\gamma_{2-1}^R$  para el baño derecho. El mapa de colores para ambos gráficos indica que el color rojo muestra las zonas donde la tasa es máxima y el azul cuando es mínima. Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ . . . . . 76



- 3-7.** Mapa de calor para la tasa de transición de probabilidad cuando se incrementa la temperatura del baño derecho  $R$  y la fuerza de acoplamiento de la interacción DM, con  $T_R > T_L$ . En la figura (a) se muestra la tasa de transición  $\gamma_{2-1}^L$  y la figura (b) muestra las tasas de transición  $\gamma_{2-1}^R$  para el baño derecho. La figura (c) Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_L = 10^{-3}$ . . . . . 77
- 3-8.** Mapa de calor para las tasas de transición de probabilidad  $\Gamma_{2-1}^L$  y  $\Gamma_{3-1}^L$  cuando se incrementa la temperatura del baño izquierdo  $L$  y la anisotropía, con  $T_L > T_R$ . En la figura (a) se muestra la tasa de transición  $\Gamma_{2-1}^L$  y en la figura (b) muestra las tasas de transición  $\Gamma_{3-1}^L$ . En la figura (c) se muestra la tasa de transición  $\Gamma_{2-1}^R$  y en la figura (d) muestra las tasas de transición  $\Gamma_{3-1}^R$ . En el mapa, el código de colores indica que el color azul es el mínimo y el rojo el máximo valor. Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ . . . 79
- 3-9.** Mapa de las tasas de transición de probabilidad  $\Gamma_{2-1}^L$  y  $\Gamma_{3-1}^L$  cuando se incrementa la temperatura del baño derecho  $R$  y la anisotropía, con  $T_L > T_R$ . En la figura (a) se muestra la tasa de transición  $\Gamma_{2-1}^L$  y en la figura (b) muestra las tasas de transición  $\Gamma_{3-1}^L$ . En la figura (c) se muestra la tasa de transición  $\Gamma_{2-1}^R$  y en la figura (d) muestra las tasas de transición  $\Gamma_{3-1}^R$ . En el mapa, el código de colores indica que el color azul es el mínimo y el rojo el máximo valor. Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_L = 10^{-3}$ . . . . 80
- 3-10.** Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración de dos qubit y dos reservorios 81
- 3-11.** Grafico de corriente y rectificación para el cálculo exacto versus las aproximaciones para baja y alta temperatura. La rectificación tiene su punto máximo en el intervalo de baja temperatura. La figura (a) muestra el ajuste para la corriente calculada de manera exacta y las calculadas analíticamente mediante las aproximaciones. La figura (b) muestra el ajuste de las aproximaciones para alta y baja temperatura en la rectificación. Condiciones:  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ . . . . . 82
- 3-12.** Rectificación y corriente  $J_L^+$  y  $J_L^-$  en el régimen de baja temperatura. La figura (a) muestra un diagrama esquemático del comportamiento de las tasas de transición de probabilidad en este régimen, mientras que la figura (b), muestra la corriente  $J_L^+$  y  $J_L^-$  calculadas de forma exacta (curvas de color negro) y las calculadas usando la aproximación de baja temperatura (curvas de color verde) para diferentes valores de  $\omega_L$ . Condiciones:  $T_R = 10^{-3}$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\omega_1 = 1.0$ ,  $\omega_2 = 1.0$ ,  $\omega_3 = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$  y  $\eta = 0.07$ . . . . . 84
- 3-13.** Rectificación y corriente  $J_L^+$  y  $J_L^-$  en el régimen de baja temperatura. La figura (a) muestra un diagrama esquemático del comportamiento de las tasas de transición de probabilidad en este régimen, mientras que la figura (b), muestra la corriente  $J_L^+$  y  $J_L^-$  calculadas de forma exacta (curvas de color negro) y las calculadas usando la aproximación de alta temperatura (curvas de color rojo) para diferentes valores de  $\omega_L$ . Condiciones:  $T_R = 10^{-3}$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\omega_1 = 1.0$ ,  $\omega_2 = 1.0$ ,  $\omega_3 = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$  y  $\eta = 0.07$ . . . . . 86

<b>3-14.</b> Mapa de calor para la rectificación para $D$ y $\chi$ vs $T_L$ . La figura (a) muestra el cambio de la rectificación cuando la fuerza de la interacción DM varia, con $\chi = 0$ . La figura (b) muestra la rectificación cuando la anisotropía es modificada, con $D = 0$ . Condiciones $\omega_R = 0$ , $\eta = 0.07$ y $T_R = 10^{-3}$ . . . . .	87
<b>3-15.</b> Diagrama esquemático de un transistor térmico compuesto por tres qubits de frecuencia $\omega_p$ que interactúan con una intensidad de acoplamiento $\eta_p$ . Cada qubit está acoplado a un reservorio con diferente temperatura. . . . .	88
<b>3-16.</b> Tasas de transición de probabilidad en cada baño cuando se incrementa la temperatura del baño $M$ . La figura (a) muestra las tasas de transición de probabilidad $\Gamma_{7-6}^L$ , $\Gamma_{8-3}^L$ , $\Gamma_{8-5}^L$ Condiciones $\omega_M = 10^{-2}$ , $\eta_L = \eta_R = 0.07$ , $T_R = 10^{-2}$ y $T_L = 10$ . . . . .	91
<b>3-17.</b> Corriente y amplificación térmica incrementa la temperatura del baño $M$ . Condiciones $\omega_M = 10^{-2}$ , $\eta_L = \eta_R = 0.07$ , $T_R = 10^{-2}$ y $T_L = 10$ . . . . .	92

# Lista de Tablas

2-1. Comparación entre las configuraciones propuestas . . . . .	63
---	----

# Introducción

Históricamente, la electrónica análoga y digital ha sido utilizada en los sistemas de transporte y procesamiento de la información. Por ejemplo, mediante circuitos integrados se controla la corriente eléctrica usando dispositivos tales como diodos y transistores que permiten su rectificación y amplificación. De igual forma, podrían existir dispositivos térmicos, análogos a los diodos y transistores, que harían posible la rectificación, conmutación y amplificación de la corriente térmica. Pero este tipo de instrumentos no existen comercialmente, a pesar que más del 50% de la energía utilizada en la industria global se pierde por disipación de calor. El uso eficiente de la energía térmica es un gran desafío científico en la actualidad debido a la limitación de fuentes energéticas, altos costos y calentamiento global. Debido a esta problemática, recientemente se han enfocado esfuerzos en el modelamiento de dispositivos como rectificadores térmicos, que son sistemas que exhiben un flujo asimétrico cuando las temperaturas en sus extremos son invertidas.

Los rectificadores térmicos son dispositivos diseñados para transporte térmico en una dirección preferencial, bloqueando el flujo en el sentido contrario. Este primer elemento ha llevado al modelamiento de otros dispositivos que también permiten la conducción controlada de calor como transistores térmicos, compuertas lógicas, entre otros [10, 11, 12, 13, 14, 7, 15]. Esto indica que la energía térmica también puede ser transportado a través de la radiación y distintos materiales, al igual que puede ser guiado a través de buenos conductores; pero no se ha estudiado de la misma forma que la energía eléctrica, ya que la energía térmica viene de vibraciones en las redes atómicas y su unidad básica es el fonón, que es una cuasipartícula que no tiene propiedades como masa o carga que pueden ser afectados por campos electromagnéticos [16].

Se han estudiado diferentes configuraciones de rectificadores térmicos, los cuales proponen la construcción de elementos análogos a la manipulación de calor en la electrónica. Para lograr este objetivo de manera teórica, se han propuesto configuraciones que en su mayoría se componen de un sistema cuántico de dos niveles acoplado a dos terminales/reservorios con temperaturas diferentes, donde el fenómeno de rectificación se da al inducir asimetría entre las terminales [12, 17, 2, 10, 18]. Las variaciones más significativas entre una propuesta y otra, van desde cambiar la naturaleza de las terminales [19, 7], hasta aumentar la comple-

alidad del acoplamiento entre el sistema central y los reservorios [20, 21, 22, 23].

Experimentalmente, la implementación de diodos térmicos ha mostrado un alto factor de rectificación. Por ejemplo, en [24] usaron una combinación de reservorios metálicos y superconductores para construir un diodo híbrido capaz de obtener factores de rectificación del 100 %. También, en [25] midieron rectificación en un arreglo asimétrico de monocapas de grafeno, entre otros [26, 27]. La realización de dichos montajes es complicado, por esta razón, el modelamiento de diodos térmicos está dirigiéndose a sistemas físicos más realistas como puntos cuánticos [28, 29, 30].

Esta tesis está organizada como sigue: el capítulo 1 se presenta el marco de referencia, el cual comienza con la motivación del estudio del transporte de energía en sistemas cuánticos, luego se explica que es un sistema cuántico abierto y como solucionar la dinámica de este cuando el sistema esta conformado por un subsistema acoplado débilmente a un baño térmico. Después se describe el tipo de interacción que se usó en las configuraciones propuestas, cómo es el transporte de energía en sistemas cuánticos y finalmente, dos conceptos muy importantes a lo largo de la tesis: corriente y rectificación térmica.

En el capítulo 2 se presenta el análisis de tres tipos de diodo térmico. Esta configuración está compuesta por un sistema de dos niveles acoplado a dos reservorios térmicos. Aquí, los reservorios son fermiónicos y uno de ellos estará sometido a un campo magnético externo. Se estudiaron de forma sistemática las tasas de transición de probabilidad, la corriente y rectificación térmica en esta configuración variando la energía característica del qubit, la diferencia de temperatura entre los baños y la intensidad del campo externo aplicado sobre uno de ellos. Adicionalmente, se presentan tres configuraciones de diodo térmico combinando el tipo de material: aislante-aislante, metal-metal y aislante-metal. En todas las configuraciones se obtuvo un factor de rectificación cercano al 100 %.

El capítulo 3 presenta dos dispositivos: un diodo térmico compuesto por un subsistema que tiene dos qubits acoplados mediante la interacción Dzyaloshinskii-Moriya (DM). Cada qubit se encuentra acoplado a un reservorio térmico de tipo bosónico. Se estudió de forma extensiva la rectificación térmica en un sistema compuesto dos sistemas de dos niveles (TLS) en qubits acoplados mediante la interacción DM. Se encontró un alto factor de rectificación, cercano al 100 %; también, se analizó cómo afecta el gap de energía de los qubit y la intensidad del acoplamiento espín-espín la rectificación, así como la influencia de los parámetros DM sobre la misma. Por otro lado, se encontraron expresiones analíticas para la rectificación y la corriente en dos regímenes, alta y baja temperatura. El segundo dispositivo es un transistor térmico, en el cual se explora corriente y la amplificación térmica entre los componentes,

encontrando también expresiones analíticas para una situación específica. Finalmente, cada capítulo al final contiene las conclusiones y perspectivas de este trabajo.

# 1. Marco de Referencia

El uso eficiente de la energía térmica en el transporte y procesamiento de la información es un desafío en la actualidad, acrecentando el interés en los sistemas a nivel microscópico, donde la mecánica cuántica rige la física de dichos sistemas. La radiación electromagnética y la conducción de electricidad y calor, son las formas en las cuales naturalmente se da la transferencia de energía en la naturaleza, siendo la conducción de calor y energía las predominantes en la tecnología. Dado esto, en la última década se concentran esfuerzos en la modelación de dispositivos térmicos, análogos a los diodos y transistores, que harían posible la rectificación, conmutación y amplificación de la corriente térmica y eléctrica [31, 4, 32, 18].

El estudio de la conversión de calor en trabajo ha sido puesto nuevamente en consideración por la nanotecnología. Estos dispositivos son capaces de transportar el calor mediante flujos de estado estacionario en sistemas mesoscópicos, introduciendo el concepto de máquinas que transforman calor en energía eléctrica y viceversa. La termodinámica cuántica nació en los últimos años para estudiar las propiedades térmicas de los sistemas mesoscópicos, los llamados “motores cuánticos” estudian el sistema modelando el transporte de energía: entrada y salida de calor desde un baño hasta el qubit y a través del qubit (corrientes térmicas), extracción de trabajo etc.[33, 34, 35, 36, 37, 38]. Algunos trabajos han estudiado la corriente desde esta perspectiva y exploran la extracción de trabajo en sistemas de dos niveles acoplados a dos baños a distintas temperaturas mientras se aplica una fuerza impulsora externa, también en la referencia [39] obtienen las decoherencias y las tasas de relajación para acoplamiento fuerte. Todos estos experimentos conllevan a pensar en la Termotrónica, análogo térmico de la electrónica, en la cual el objetivo principal es construir análogos térmicos del diodo eléctrico [6, 40, 41], compuertas lógicas, entre otras aplicaciones [42].

Es necesario entender el direccionamiento del calor en una dirección preferencial (rectificación térmica) en los sistemas cuánticos abiertos. El estudio de los sistemas abiertos por fuera del equilibrio tiene como finalidad conocer la dinámica de sistemas que son sacados del equilibrio cambiando su entorno, por ejemplo, modificando la temperatura del baño que rodea al sistema o acoplando y desacoplando periódicamente el sistema del baño. En este caso, el sistema se encuentra por fuera del equilibrio y ya que los baños tienen diferentes temperaturas, generan en el sistema un flujo de calor que puede ser estudiado. Un primer

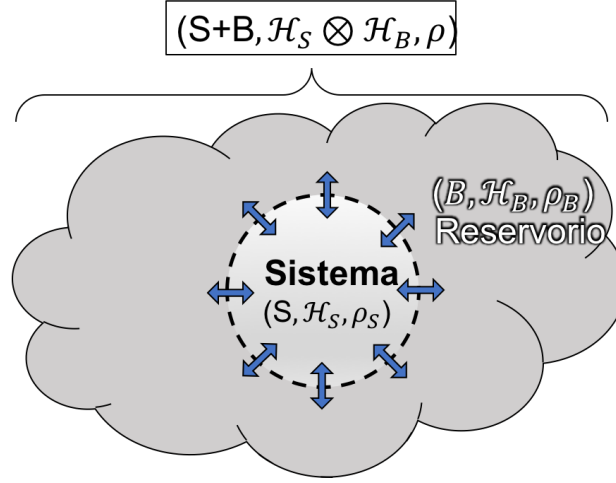
paso en esta dirección es considerar el sistema más simple, es decir un qubit acoplado a dos baños a diferentes temperaturas, y calcular la corriente de calor en el estado estacionario entre el qubit y cada uno de los reservorios [2, 3, 7, 35, 40, 19]. Algunos experimentos en esta área son [8], donde se muestra una configuración para un diodo térmico usando dos baños de diferente naturaleza (metal-superconductor) y [43] donde encuentran la corriente que existe entre dos puntos cuánticos. Estos montajes motivaron la pregunta de cómo lograr el control del flujo calor de una forma más eficiente utilizando la ingeniería de reservorios en vez de manipular directamente el qubit o las interacciones qubit-baño [7, 8, 41], lo cual implica un costo tecnológico menor para aplicaciones reales.

Este capítulo está organizado de la siguiente manera: La sección 1.1 describe un sistema cuántico abierto, su dinámica y las diferentes aproximaciones para llegar a las ecuaciones maestras que permiten describirla. La sección 1.2 describe los tipos de subsistema que se usaron a lo largo de esta tesis, además de los modelos de interacción entre el subsistema y el reservorio que se usaron. La sección 1.3 se refiere al transporte de energía en sistemas cuánticos abiertos y su definición desde la termodinámica cuántica. En la sección 1.4 se encuentra la expresión para la corriente térmica y finalmente, se discute y se encuentran las expresiones para evaluar si las configuraciones propuestas son buenos candidatos para ser dispositivos en termotrónica.

## 1.1. Sistemas cuánticos abiertos

Como indican Breuer y Petruccione [44], un sistema cuántico abierto es aquel que se compone de un subsistema central  $S$  acoplado a un sistema  $B$ , llamado entorno o reservorio. En la mayoría de los casos, este sistema completo puede ser considerado cerrado, siguiendo la dinámica Hamiltoniana. El estado del subsistema cambiará debido a su propia dinámica y a la interacción con el entorno que lo rodea, como muestra la figura **1-1**. La interacción entre el sistema central y el entorno, conlleva a que la dinámica de  $S$  no pueda ser representada en términos de la dinámica Hamiltoniana. La evolución inducida por el subsistema se le llama entonces dinámica reducida.





**Figura 1-1.:** Diagrama esquemático de la interacción entre un sistema cuántico  $S$  y un reservorio  $B$  que componen un sistema abierto.

De la figura 1-1 se denota el espacio de Hilbert del subsistema central como  $\mathcal{H}_S$  y el espacio de Hilbert del reservorio como  $\mathcal{H}_B$ . El espacio de Hilbert del sistema completo  $S + B$  será entonces el producto tensorial  $\mathcal{H}_I = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ . El Hamiltoniano total del sistema será

$$H_T = H_S \otimes I_B + I_S \otimes H_B + \hat{H}_I, \quad (1-1)$$

donde  $H_S$  es el Hamiltoniano del subsistema,  $H_B$  el Hamiltoniano del reservorio y  $H_I$  describe el Hamiltoniano de interacción entre el entorno y el subsistema.  $I_B$  y  $I_S$  son las matrices identidad que representan cada espacio de Hilbert del reservorio y el sistema, respectivamente. El entorno o reservorio se usa como un término general para un sistema cuántico que posee infinitos grados de libertad, de tal forma que sus frecuencias son continuas. También puede ser llamado baño o baño térmico y será usado cuando el reservorio se encuentra en el estado de equilibrio térmico [45]. De aquí en adelante, se omitirán los productos tensoriales mostrados en la ecuación 1-1.

A continuación, se presentará la dinámica de un sistema cuántico abierto en términos de ecuaciones maestras. Estas ecuaciones sirven para obtener la evolución temporal del operador densidad reducido del subsistema, trazando sobre los grados de libertad del operador densidad del sistema completo. La razón por la cual se realiza esta reducción, es por que en este caso no es de interés la dinámica del sistema completo, que además puede resultar muy compleja de resolver en algunas situaciones; así como tampoco interesa la dinámica del entorno que resultará invariante ante la evolución del subsistema. Es importante anotar que las ecuaciones maestras dan una solución aproximada de la dinámica del sistema y existen sistemas que no obedecen a este tipo de ecuaciones, como los sistemas de estado sólido a baja temperatura [46, 45].

### 1.1.1. Dinámica de los sistemas cuánticos abiertos

La dinámica reducida de un sistema cuántico abierto es determinada por la la traza sobre los grados de libertad del entorno  $B$  en la evolución del operador densidad total  $\hat{\rho}_T$ , como expresa la ecuación

$$\rho_S = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_T(t)) \equiv \text{Tr}_B(\hat{U}(t)\hat{\rho}_T(t)\hat{U}^\dagger(t)). \quad (1-2)$$

Aquí,  $\rho_S$  es el operador densidad para el subsistema y  $\hat{U}(t)$  es el operador evolución temporal para el sistema total. Como se puede ver, para encontrar la dinámica reducida del subsistema central, es necesario conocer la dinámica del sistema completo, lo cual es imposible. Un ejemplo claro es el caso de los baños térmicos, en los cuales trazar sobre los grados de libertad del sistema completo lleva a la aparición de términos más complicados, que dificultan la solución de dicho sistema [45, 47]. El cálculo de la dinámica del sistema también puede ser realizado usando un generador de semigrupo dinámico en mecánica cuántica que genere la evolución de  $\rho_S$ , donde

$$\rho_S = V(t)\rho_S(0). \quad (1-3)$$

En esta expresión,  $\hat{\rho}_S(0)$  es el estado inicial del subsistema,  $\hat{V}(t)$  es llamado mapa dinámico y representa un operador que actúa sobre otro operador, comúnmente llamado superoperador. Esta ecuación es la forma más general para una ecuación maestra del sistema reducido. Teóricamente la ecuación 1-2 es igual a la 1-3, así

$$\hat{V}(t)\hat{\rho}_S(0) = \text{Tr}_B(\hat{U}(t)\hat{\rho}_T(t)\hat{U}^\dagger(t)). \quad (1-4)$$

Esto implica que se puede preparar el estado inicial del sistema como  $\rho_T(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B$ , donde  $\rho_B$  representa algún estado del reservorio. Adicional a la ecuación maestra, también es posible derivar la evolución temporal del operador densidad del subsistema mediante la ecuación de movimiento de Liouville-von Neumann, trazando sobre los grados de libertad del reservorio

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) = -i\text{Tr}_B \left[ \hat{H}_T(t), \hat{\rho}_T(t) \right]. \quad (1-5)$$

Esta ecuación representa la evolución unitaria del subsistema en presencia del entorno que ocasiona una perturbación en el subsistema, re-normalizando los niveles de energía del sistema. Este efecto es llamado Lamb-shift y solo afecta la evolución unitaria del sistema. En aras de obtener una solución aproximada de la dinámica del subsistema, se desea obtener una ecuación maestra en la forma de semigrupo dinámico, esto, desde la ecuación 1-4 imponiendo ciertas aproximaciones sobre la dinámica de los estados del subsistema y el entorno.

### 1.1.2. Ecuación Maestra de Born-Markov

La ecuación de Born-Markov en términos generales se basa en dos suposiciones sobre el sistema total, como lo muestra Scholssbauer en [46]:

- **Aproximación de Born:** En esta aproximación, la interacción entre el subsistema y el entorno es lo suficientemente débil y el entorno lo suficientemente grande para que el subsistema no genere cambios sobre él; así, la dinámica del mismo permanece invariante ante el acoplamiento. Con esto, el operador densidad del sistema total puede ser expresado como  $\hat{\rho}_T(t) \approx \hat{\rho}_S(t)\hat{\rho}_B$ .
- **Aproximación de Markov:** En esta aproximación se desprecian los efectos de memoria del reservorio, esto implica que las correlaciones que genera el entorno consigo mismo gracias al acoplamiento con el sistema, decaen rápidamente comparado con la escala de tiempo característica del sistema. Así, el estado del entorno no depende de los estados anteriores, sino de su estado actual.

La derivación de la ecuación maestra empieza desde la ecuación de movimiento de Liouville-von Neumann descrita en 1-5 [45, 46, 47], se integra a ambos lados y luego se traza sobre los grados de libertad del entorno, obteniendo

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i \int_0^t ds \text{Tr}_B [H_I(t), [H_I(s), \rho_T(s)]] . \quad (1-6)$$

En esta ecuación se asumió que  $\text{Tr}_B [H_I(t), \rho_T(0)] = 0$ . En este punto se aplica la aproximación de Born con  $\rho(t) \approx \rho_S(t)\rho_B$ , con lo cual la ecuación anterior queda

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i \int_0^t ds \text{Tr}_B [H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s)\rho_B]] . \quad (1-7)$$

A pesar que esta ecuación está simplificada, no es una ecuación local en el tiempo, pues aún tiene los efectos de memoria. Aquí se aplica la aproximación de Markov, la cual transforma la ecuación para que el comportamiento futuro solo dependa del estado presente. Esto implica que se debe reemplazar  $\rho_T(s)$  por  $\rho_T(t)$  en el lado derecho de la ecuación 1-7, como sigue

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i \int_0^t ds \text{Tr}_B [H_I(t), [H_I(s), \rho_S(t)\rho_B]] . \quad (1-8)$$

Esta última aproximación tiene ciertas implicaciones sobre las escalas de tiempo del sistema, como el tiempo que el entorno guarda información sobre los estados anteriores (funciones de auto-correlación) y la escala de tiempo en la cual el subsistema evoluciona significativamente. Esto quiere decir que la memoria del entorno es muy corta en comparación de la escala típica de evolución del sistema. La ecuación 1-8 es llamada de Redfield [45] y es una ecuación local en el tiempo, pero no cumple a cabalidad la aproximación markoviana, ya que aún depende

de un estado inicial en  $t = 0$ , por tanto, no se expresa como un semigrupo dinámico. Para que esto se cumpla, se sustituye  $s$  por  $t - s$ , lo que permite reescribir el límite superior en la ecuación 1-8 como infinito, transformando la ecuación en

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i \int_0^\infty ds \text{Tr}_B [H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t)\rho_B]]. \quad (1-9)$$

Este último paso se justifica gracias a que el integrando en esta ecuación desaparece lo suficientemente rápido cuando  $s$  es mucho mayor que la escala del baño. Esta es una ecuación de tipo integro-diferencial, llamada la ecuación maestra de Born-Markov y es una de las ecuaciones más usadas en el estudio de sistemas cuánticos abiertos y la decoherencia.

### 1.1.3. Ecuación maestra en la forma de Lindblad

La ecuación maestra en la forma de Lindblad es un caso especial de la ecuación maestra de Born-Markov y se encuentra aplicando una aproximación adicional sobre esta, llamada la **aproximación de onda rotante**. Esta aproximación se realiza como un requerimiento para asegurar la positividad del operador densidad en todo tiempo [46], es decir

$$\langle \psi | \rho_s(t) | \psi \rangle \geq 0, \quad (1-10)$$

donde  $|\psi\rangle$  es un estado puro del subsistema para todo  $t$ . Esta condición es requerida desde el sentido físico del problema, ya que los términos  $\langle \psi | \rho_s(t) | \psi \rangle$  son interpretados como probabilidades de ocupación en el subsistema, si la evolución de  $\rho_S(t)$  puede ser solucionada de forma exacta, esta condición se cumple; pero este requisito no puede ser asegurado en las ecuaciones maestras, debido a las aproximaciones usadas en su tratamiento. La aproximación de onda rotante elimina los términos que oscilan rápidamente, ya que no contribuyen en la integral de la ecuación 1-9. Para llegar a la forma de Lindblad se seguirá el formalismo presentado en [45] que empieza por describir el Hamiltoniano de interacción en el cuadro de Schrödinger

$$H_I = \sum_{\alpha} \hat{A}_{\alpha} \otimes \hat{B}_{\alpha}, \quad (1-11)$$

donde  $\hat{A}_{\alpha} = \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}$  y  $\hat{B}_{\alpha} = \hat{B}_{\alpha}^{\dagger}$ , corresponden a los operadores del subsistema y el reservorio, respectivamente. Para facilitar el cálculo, se descompondrá el Hamiltoniano de interacción en operadores propios del Hamiltoniano del subsistema. También se supondrá que el espectro de  $H_S$  es discreto, con

$$A_{\alpha}(\omega) = \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \Pi(\epsilon'). \quad (1-12)$$

Aquí,  $\epsilon$  son los valores propios de  $H_S$  y  $\Pi(\epsilon)$  es la proyección sobre los espacios propios que pertenecen a  $\epsilon$ . La suma se realiza sobre todos los valores propios  $\epsilon$  y  $\epsilon'$  con una diferencia de energía fija  $\omega$ . Esta definición trae como consecuencia que

$$\begin{aligned} [H_S, A_\alpha(\omega)] &= -\omega A_\alpha(\omega), \\ [H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)] &= +\omega A_\alpha^\dagger(\omega). \end{aligned} \quad (1-13)$$

Con esto, los operadores  $A_\alpha(\omega)$  y  $A_\alpha^\dagger(\omega)$  son los operadores propios de  $H_S$ , pertenecientes a las frecuencias  $\pm\omega$ , respectivamente. De esta relación, se obtienen los operadores del subsistema en el cuadro de interacción,

$$\begin{aligned} e^{iH_S t} A_\alpha(\omega) e^{-iH_S t} &= e^{-iH_S t} A_\alpha(\omega) \\ e^{iH_S t} A_\alpha^\dagger(\omega) e^{-iH_S t} &= e^{iH_S t} A_\alpha^\dagger(\omega). \end{aligned} \quad (1-14)$$

De esta relación es inmediato que  $[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)A_\alpha(\omega)] = 0$  y  $A_\alpha^\dagger(\omega) = A_\alpha(-\omega)$ . Desde este punto, la suma de todas las energías en la ecuación 1-12, se tiene que  $\sum_\omega A_\alpha(\omega) = \sum_\omega A_\alpha^\dagger(\omega) = A_\alpha(\omega)$ . Esta re-escritura de los operadores permite expresar el Hamiltoniano de interacción del subsistema como

$$H_I = \sum_{\alpha, \omega} A_\alpha(\omega) \otimes B_\alpha = \sum_{\alpha, \omega} A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes B_\alpha. \quad (1-15)$$

Esta descomposición muestra que el espectro de frecuencias es degenerado, ya que para una frecuencia fija  $\omega$ , el subíndice  $\alpha$  puede simbolizar diferentes operadores para esta misma frecuencia. Ahora, tomando los operadores en 1-14 y la ecuación 1-15, se puede escribir  $H_I$  en el cuadro de interacción

$$H_I(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{-iH_S t} A_\alpha(\omega) \otimes B_\alpha(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{iH_S t} A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes B_\alpha(t). \quad (1-16)$$

Aquí,  $B_\alpha(t) = e^{iH_S t} B_\alpha(\omega) e^{-iH_S t}$  son los operadores en el cuadro de interacción del entorno. Teniendo en cuenta la aproximación de Born,  $\langle B_\alpha(\omega)(t) \rangle \equiv \text{Tr}_B (B_\alpha(\omega)(t)\rho_B) = 0$ . Insertando la relación 1-16 e integrando sobre  $ds$  en la ecuación 1-9,

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \rho_s(t) &= \int_0^\infty ds \text{Tr}_B (H_I(t-s)\rho_s(t)\rho_B H_I(t) - H_I(t)H_I(t-s)\rho_s(t)\rho_B) + \text{h.c.} \\ &= \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{-i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) (A_\beta(\omega)\rho_s(t)A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega')A_\beta(\omega)\rho_s(t)) + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (1-17)$$

En esta ecuación, h.c es el conjugado hermítico del primer término y el término  $\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ , es la transformada de Fourier de las funciones de correlación del baño. Teniendo en cuenta nuevamente la aproximación de Born, donde el entorno no sufre cambios por el acople con el subsistema, se llega a que dichas funciones son constantes en el tiempo.

La escala típica de la evolución del subsistema se denota como  $\tau_S$ . Esta escala está definida por  $|\omega' - \omega|$ , con  $\omega' \neq \omega$ . Si  $\tau_S$  es grande comparado con el tiempo de relajación  $\tau_R$  en los términos  $\omega' \neq \omega$ , dichos términos pueden ser despreciados dada su rápida oscilación. Con esto,

$$\frac{d}{ds}\rho_s(t) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) (A_{\beta}(\omega)\rho_s(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\beta}(\omega)\rho_s(t)) + \text{h.c.} \quad (1-18)$$

Finalmente, es conveniente descomponer la transformada de Fourier de la función de correlación de los reservorios en una parte imaginaria  $S_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2} (\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) - \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega))$  y una real,

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_{\alpha}(s)B_{\beta}(0) \rangle. \quad (1-19)$$

Con esto en la ecuación 1-18, se llega a la ecuación Maestra en la forma de Lindblad,

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_{LS}(t), \rho_S(t)] + \mathcal{D}(\rho_S(t)). \quad (1-20)$$

Aquí, el operador Hermítico  $H_{LS} = S_{\alpha\beta}(\omega)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\beta}(\omega)$ , es el Hamiltoniano de Lamb-shift que conlleva a la renormalización de los niveles de energía no perturbados inducidos por la dinámica subsistema-reservorio. Es importante anotar que debido a la forma de este Hamiltoniano, su conmutador con los Hamiltonianos libres del subsistema es cero. El término  $\mathcal{D}(\rho_S(t))$  es llamado disipador y toma la forma

$$\mathcal{D}(\rho_S) = \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left( A_{\beta}(\omega)\rho_S(t)A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') - \frac{1}{2}\{A_{\alpha}^{\dagger}(\omega')A_{\beta}(\omega), \rho_S(t)\} \right). \quad (1-21)$$

Es importante anotar que para llegar a la forma de Lindblad no solo se recurre a la aproximación de onda rotante, si no que también se recurrió a la aproximación de Born para la reescritura de términos en términos de las frecuencias re-normalizadas del sistema. La ecuación maestra de Lindblad representa una forma intuitiva de monitorear la influencia del reservorio en un sistema cuántico abierto y toda la física en ella se encuentra en los coeficientes  $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ , que representan las tasas de transición de probabilidad entre los niveles de energía en el sistema.

#### 1.1.4. Ecuación maestra de Pauli

A lo largo de las secciones anteriores, se consideró un sistema físico en el cual el reservorio está en estado estacionario, ya que bajo la aproximación de Born, los baños son invariantes ante la dinámica del subsistema central al cual se encuentra acoplado. Ahora, se considera la

situación en la cual el reservorio es un baño térmico a una temperatura inversa  $\beta = 1/k_B T$  y se espera que el operador densidad corresponda a un estado de Gibbs  $\rho_{th}$

$$\rho_{th} = \frac{e^{-\beta H_S}}{\text{Tr}_S e^{-\beta H_S}}. \quad (1-22)$$

Es posible mostrar que para cualquier estado inicial el sistema retorna al equilibrio, es decir  $\rho_S \rightarrow \rho_{th}$  cuando  $t \rightarrow \infty$ . En esta situación especial, las coherencias desaparecen y la dinámica del sistema completo solo depende de las poblaciones en el subsistema. En este caso, las funciones de correlación del baño se transforman en

$$\langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(0) \rangle = \langle B_\beta(0) B_\alpha^\dagger(t + i\beta) \rangle. \quad (1-23)$$

Esta ecuación introducida en la ecuación 1-19, transforma las funciones de correlación del baño térmico en

$$\gamma_{\alpha\beta}(-\omega) = e^{-\beta\omega} \gamma_{\beta\alpha}(\omega), \quad (1-24)$$

también, los operadores del subsistema mencionados en la ecuación 1-14 evolucionan como

$$\begin{aligned} \rho_{th} A_\alpha(\omega) &= e^{\beta\omega} A_\alpha(\omega) \rho_{th}, \\ \rho_{th} A_\alpha^\dagger(\omega) &= e^{-\beta\omega} A_\alpha^\dagger(\omega) \rho_{th}. \end{aligned} \quad (1-25)$$

Si el Hamiltoniano del subsistema  $H_S = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n|$  tiene un espectro no degenerado, es posible obtener una ecuación de movimiento para las poblaciones como  $P(n, t) = \langle n | \rho_S(t) | n \rangle$ , a partir de los autoestados  $|n\rangle$ . Esta ecuación desacopla los términos no diagonales en el Hamiltoniano del subsistema; con esto, la ecuación 1-9 puede ser escrita como

$$\dot{P}_n(t) = \sum_m [W(n|m)P_m(t) - W(m|n)P_n(t)]. \quad (1-26)$$

Esta ecuación es conocida como la ecuación Maestra de Pauli, donde  $W(n|m) = \sum_{\alpha,\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\epsilon_m - \epsilon_n)$  son las tasas de transición independientes del tiempo. Estas tasas son reales y positivas como consecuencia de la positividad de  $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ .

## 1.2. Modelo de Interacción subsistema-reservorio

### 1.2.1. Sistemas de dos niveles (TLS) o Qubits

Los sistemas de dos niveles (Two Level Systems o TLS por su sigla en inglés) son sistemas cuánticos que poseen dos niveles de energía bien definidos. En computación cuántica, los TLS son llamados bits cuánticos o *qubits* y como su nombre lo indica son la representación cuántica del bit clásico, que tiene dos posibles valores mutuamente excluyentes cero y uno;

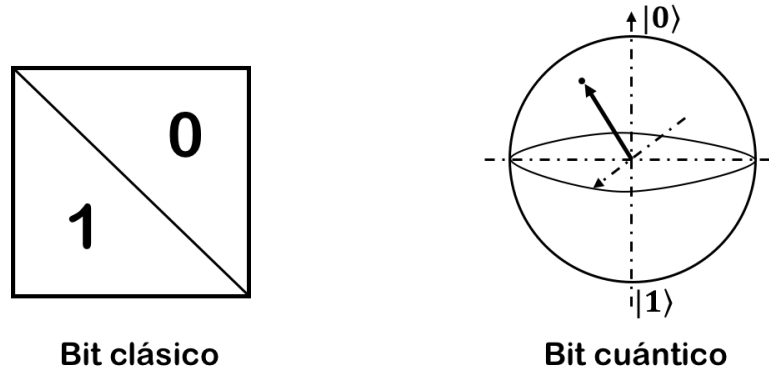
en contraste con el qubit, que representa un espacio de estados bi-dimensional como muestra la figura **1-2**, con vectores de estado ortonormales  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ . Cualquier estado arbitrario  $|\psi\rangle$  puede ser representado mediante la superposición

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle. \quad (1-27)$$

Donde los vectores de estado representan los kets

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1-28)$$

En la figura se muestra la representación de los posibles estados en la llamada esfera de Bloch, que se refiere a representación geométrica del espacio abstracto, que puede ser una proyección del espacio de Hilbert. Alternativo a la esfera de Bloch, también es posible representar los estados de un qubit por medio del operador densidad  $|\psi\rangle \rightarrow \rho_S = |\psi\rangle\langle\psi|$ .



**Figura 1-2.:** Diagrama esquemático de un bit clásico y un bit cuántico o qubit. Los estados de un bit clásico son mutuamente excluyentes, mientras que los estados de un qubit son una superposición de los posibles estados en los cuales se puede encontrar el sistema.

Muchos sistemas físicos son modelados como TLS o qubits, tales como: espines nucleares o electrónicos, átomos de dos niveles artificiales o naturales, polarización de un fotón, entre otros [48]. En la última década se ha mostrado grandes avances en cuanto al almacenamiento, transmisión y procesamiento de información que provenga de elementos con propiedades cuánticas; el problema sigue siendo, aún, la implementación física de los dispositivos que cumplan con las características adecuadas, como las enunciadas por DiVicenzo et al [49].

El qubit cuántico más simple de donde se pueden obtener sistemas de dos niveles es en átomos aislados, tal como ocurre en cavidades en electrodinámica, trampas de átomos y enrejado óptico con láser. Los qubits también pueden tener un tamaño mayor a éstos y son llamados



átomos artificiales. Por ejemplo, las aplicaciones se basan en materiales semiconductores y superconductores, por lo cual, un qubit pueden ser átomos artificiales bidimensionales efectivos como los puntos cuánticos que pueden ser manipulados con voltajes, corrientes y campos magnéticos, como es el caso de esta tesis.

## 1.2.2. Modelos de Interacción espín-reservorio

Existen cuatro modelos de interacción entre el subsistema central y el reservorio ya que son muy generales, esto se debe a que los detalles de muchos sistemas físicos están representados por una serie de parámetros como la densidad espectral y los coeficientes en la ecuación maestra, que pueden ser escogidos a conveniencia para cada situación [46]. En el caso de esta tesis, se tratan dos modelos en específico: El primero es el modelo espín-espín, en el cual un qubit o espín es puesto a interactuar con dos baños térmicos de espín que no interactúan. El segundo es el modelo espín-bosón, en el cual un sistema central compuesto por uno o varios qubits es puesto a interactuar cada uno con baños bosónicos que no interactúan.

### Interacción espín-espín

El modelo espín-espín considera el estudio de un sistema de dos niveles acoplado a un baño fermiónico, como una colección infinita de espines semi-enteros  $1/2$ . Se considera un hamiltoniano total

$$H_T = H_S + H_B + H_I. \quad (1-29)$$

Aquí,  $H_S = \omega_0 \sigma_x$  es el Hamiltoniano del subsistema, donde los autoestados de  $\sigma_x$  están dados por los kets considerados en 1-28. El término  $\omega_0$  se refiere a la diferencia de energías entre los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ .  $H_B$  representa el Hamiltoniano libre del baño de espines

$$H_B = \sum_{k,\alpha} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}, \quad (1-30)$$

los operadores  $c_i^\dagger$  y  $c_i$  son los operadores creación y aniquilación, los cuales obedecen a las relaciones de conmutación correspondientes a los fermiones. Finalmente, el Hamiltoniano de interacción

$$H_I = \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \sum_{k,p,\alpha,\beta} c_{k\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p,\beta}. \quad (1-31)$$

Aquí,  $\lambda$  es la fuerza del acoplamiento entre el subsistema y el reservorio. Este acoplamiento entre el sistema central y cada reservorio describe la interacción de electrones de conducción con un espín localizado.

### Interacción tipo Espín-Bosón

El modelo espín-bosón describe un TLS acoplado linealmente a un reservorio de osciladores armónicos que no interactúan entre si [45, 46]. El Hamiltoniano de este modelo es descrito por la ecuación 1-1, donde el Hamiltoniano del subsistema  $H_S$  se expresa como:

$$H_S = \frac{1}{2}\omega_0\sigma_z, \quad (1-32)$$

donde los autoestados de  $\sigma_z$  están dados por los kets considerados en 1-28. El término  $\omega_0$  se refiere a la diferencia de energías entre los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ . El término  $H_B$  denota el Hamiltoniano del baño, que es una colección infinita de osciladores armónicos,

$$H_B = \sum_i \left( \frac{1}{2m_i}p_i^2 + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2q_i^2 \right). \quad (1-33)$$

Este Hamiltoniano describe el  $i$ -ésimo oscilador armónico con su frecuencia natural  $\omega_i$ , la masa  $m_i$  y los operadores momentum y posición  $q_i$  y  $p_i$ , respectivamente. Finalmente, el Hamiltoniano de interacción  $H_I$  está definido como

$$H_I = \sigma_z \otimes \sum_i c_i q_i, \quad (1-34)$$

que describe el acoplamiento lineal de la coordenada  $\sigma_z$  con la posición  $q_i$  de cada oscilador armónico del baño, con una fuerza de acoplamiento  $c_i$ . Resulta conveniente reescribir el Hamiltoniano en términos los operadores de creación  $a_i^\dagger$  y aniquilación  $a_i$  para cada modo. Con esto, se obtendrá una notación mas compacta; además, se prescindiría de la escritura explícita de los osciladores armónicos. Usando la relación de los operadores posición y momentum en segunda cuantización

$$\begin{aligned} q_i &= \sqrt{\frac{1}{2m_i\omega_i}} (a_i + a_i^\dagger), \\ p_i &= -\sqrt{\frac{1}{2m_i\omega_i}} (a_i - a_i^\dagger), \end{aligned} \quad (1-35)$$

e introduciendo estas dos expresiones en los Hamiltonianos, se obtiene

$$H_T = \frac{1}{2}\omega_0\sigma_z + \sum_i \omega_i a_i^\dagger a_i + \sigma_x \otimes \sum_i (g_i a_i^\dagger + g_i^* a_i). \quad (1-36)$$

Los operadores  $a_i^\dagger$  y  $a_i$  obedecen a las relaciones de conmutación correspondientes a los bosones  $[a_i^\dagger, a_i] = \delta_{ij}$ .

## 1.3. Corriente térmica

### 1.3.1. Transporte de energía: Calor y trabajo

De manera clásica, el trabajo  $W$  se define en termodinámica como la energía que se transfiere de un cuerpo a otro cuando se ejerce una fuerza entre ellos. El calor  $Q$  se define como el flujo de energía que se produce entre dos cuerpos cuando se encuentran a diferentes temperaturas. Siguiendo esta definición clásica para ambos conceptos, al considerar un sistema cuántico compuesto por un qubit acoplado a un reservorio térmico, el trabajo se produce cuando hay agentes externos en el sistema, por ejemplo fuerzas externas sobre el qubit [35]. De esta misma manera, el calor será considerado como la energía que fluye desde un reservorio térmico hacia el qubit. Si se realiza trabajo sobre el qubit al tiempo que existe un flujo de energía desde el reservorio hacia él, la conservación de la energía indica que la energía total del sistema  $E_T$  será

$$E_T = Q + W. \quad (1-37)$$

Cuando  $W < 0$ , el sistema hace trabajo sobre el agente externo y  $W > 0$ , cuando el agente realiza trabajo sobre el sistema. La ecuación 1-37 es muy bien conocida como la primera ley de la termodinámica. Se asume que el qubit se encuentra en equilibrio térmico con el reservorio. Esto implica que el sistema se encuentra en un estado de Gibbs  $\rho_{th}$ , descrito en la ecuación 1-22, [45]. Considerando  $H$  como el Hamiltoniano del sistema, el valor esperado de la energía  $E_T = \langle H \rangle = \text{Tr}(\rho_{th}H) = \sum_n E_{Tn}P_n$ , y suponiendo que el cambio neto de energía en el sistema no depende de los pasos intermedios, solo de los estados final e inicial, se obtiene que

$$\dot{E}_T = \text{Tr}(\rho_{th}\dot{H}) + \text{Tr}(\dot{\rho}_{th}H) = \sum_n [(dE_{Tn})P_n + E_{Tn}(dP_n)]. \quad (1-38)$$

Aquí,  $P_n = \langle n|\rho_{th}|n \rangle$  es la probabilidad de encontrar el sistema en el estado  $|n\rangle$ . Teniendo en cuenta la ecuación 1-37, la ecuación 1-38 muestra que el cambio en la energía total se compone de dos tasas de transición: la primera  $\delta W = \text{Tr}(\rho_{th}\dot{H}) = (dE_{Tn})P_n$ , es la tasa de transición de energía cuando el Hamiltoniano cambia o tasa de trabajo. La segunda, denota la tasa de transición de probabilidad en los estados del sistema o tasa de transferencia de calor, esto sucede mientras la energía permanece fija [38, 50] y se escribe como sigue,

$$\delta Q = \text{Tr}(\dot{\rho}_{th}H) = E_{Tn}(dP_n). \quad (1-39)$$

El interés de esta tesis está centrado en la transferencia de calor en uno o varios sistemas acoplados a baños térmicos, por lo tanto, se estudiará las tasas de transición de probabilidad en sistemas específicos para analizar cómo se da el flujo de energía en ellos.

En la bibliografía se reportan dos formas de encontrar la corriente de calor en los sistemas

cuánticos abiertos y depende de la aproximación que tomen en la ecuación maestra. La primera toma la definición de corriente dada en la ecuación 1-39. En la segunda, se construye el operador corriente de calor suponiendo que es posible definir una ecuación de continuidad para la energía.

### 1.3.2. Corriente desde el operador flujo de calor

En esta sección se muestra el formalismo para obtener la expresión de la corriente cuando se tiene un subsistema central acoplado a un baño térmico conformado por una cadena de espines siguiendo el procedimiento conforme a Wu et al. en [3]. Primero, se supone que es posible definir la ecuación de continuidad para el flujo de energía en una dimensión:

$$\frac{\partial \hat{h}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (1-40)$$

donde  $\hat{h}(x, t)$  es el operador densidad de energía y  $\hat{j}(x, t)$  es el operador flujo de calor. Discretizando la ecuación anterior con  $\hat{h}(x, t) = \sum_n \hat{h}_n \delta(x - x_n)$  (esto se puede realizar ya que se supone que el flujo de energía va de un espín a otro) y de forma similar el operador corriente  $\hat{j}(x, t) = \sum_n \hat{j}_n \delta(x - x_n)$  ( $\hat{h}_n$  y  $\hat{j}_n$  son las respectivas contribuciones de los operadores en el  $n$ -ésimo lugar), también, tomando el Hamiltoniano total como  $\hat{H} = \int dx \hat{h}(x, t) = \sum_n \hat{h}_n$ , la ecuación de continuidad toma la forma:

$$\frac{d\hat{h}_n}{dt} = \hat{j}_{n-1} - \hat{j}_n \quad (1-41)$$

Las ecuaciones de movimiento para los Hamiltonianos individuales en el sistema y los valores esperados son del tipo  $\frac{d}{dt} \langle \hat{H}_s \rangle = \langle \dot{\hat{H}}_s \rangle = \text{Tr}[\dot{\hat{H}}_s \rho]$ , como se expresó en la ecuación 1-39. Tomando un Hamiltoniano de la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + V_L \cdot \sigma_c + V_R \cdot \sigma_c, \quad (1-42)$$

donde  $L$  y  $R$  son los reservorios izquierdo y derecho, respectivamente.  $\sigma_c$  es la matriz de Pauli mencionada anteriormente. De esta descripción se pueden obtener tres definiciones que modelan el flujo de energía tomando el valor esperado del operador  $j$  positivo cuando la corriente fluye de  $L$  a  $R$ :

1. Energía que gana (o pierde) el baño izquierdo  $-\hat{j}_L^{(1)} = \dot{h}^{(1)} = i[V_L, \hat{H}_L]$
2. Energía que es transferida desde o hacia el baño  $-\hat{j}_L^{(2)} = \dot{h}^{(2)} = i[V_L, \hat{H}_S]$
3. Energía promedio  $-\hat{j}_L^{(3)} = \dot{h}^{(3)} = \frac{i}{2}[\hat{H}_S - \hat{H}_L, V_L]$ .

En las referencias [7, 3] usan la definición  $j_L^{(3)}$  y  $j_L^{(1)}$  y en la referencia [51] usan  $j_L^{(2)}$ . Para el tratamiento de corrientes en el estado estacionario ( $t \rightarrow \infty$ ), las tres formas del operador corriente son equivalentes, entonces es posible encontrar la corriente de calor  $J$  entre los reservorios y el subsistema central aplicando el operador flujo de calor  $j$ , como se indica en [52] y son ampliamente usadas en la literatura como se reporta en [53, 43, 54, 55, 56]. A partir de esto, es posible una expresión para el operador densidad

$$J = \text{Tr}[\hat{j}\rho_S]; \quad \hat{j} = \frac{i}{2}[V_L, \hat{H}_S] + \frac{i}{2}[\hat{H}_S, V_R]. \quad (1-43)$$

Si los Hamiltonianos en el sistema total tienen una forma genérica

$$\begin{aligned} \hat{H}_S &= \sum_n E_n |n\rangle\langle n|, \\ V_\nu &= \lambda_\nu A B_\nu, \\ A &= \sum_{n,m} A_{n,m} |n\rangle\langle m|. \end{aligned} \quad (1-44)$$

Con  $\nu = \{L, R\}$ ,  $A_{n,m} = A_{m,n}$  y  $E_{n,m} = E_n - E_m$ , se obtiene que la ecuación 1-43 se transforma en

$$J = \frac{i}{2} \sum_{n>m} E_{n,m} A_{n,m} \text{Tr}_B [\lambda_L (\rho_{n,m} - \rho_{m,n}) B_L] - \frac{i}{2} \sum_{n>m} E_{n,m} A_{n,m} \text{Tr}_B [\lambda_R (\rho_{n,m} - \rho_{m,n}) B_R]. \quad (1-45)$$

Es inmediato de la ecuación anterior que se debe calcular los elementos de matriz  $\rho_{n,m}$  para el operador densidad del sistema total, esto es posible acudiendo a la ecuación de movimiento de Liouville-von Neumann

$$\dot{\rho}_{n,m} = -i E_{n,m} \rho_{n,m} - \sum_\nu \sum_p \lambda_\nu [B_\nu(t) A_{n,p} \rho_{p,m}(t) - A_{p,m} \rho_{n,p}(t) B_\nu(t)]. \quad (1-46)$$

Aquí,  $B_\nu(t)$  son los operadores del baño en el cuadro de interacción y el subíndice  $p$  cuenta los estados del subsistema. Integrando esta ecuación y despreciando la condición inicial ya que no tiene ninguna contribución luego de trazar sobre los grados de libertad del baño, se llega a

$$\rho_{n,m} = -i \int_0^t e^{-i E_{n,m}(t-\tau)} \left[ \sum_{\nu,p} \lambda_\nu B_\nu(\tau) A_{n,p} \rho_{p,m}(\tau) - \sum_{\nu,p} \lambda_\nu A_{p,m} \rho_{n,p}(\tau) B_\nu(\tau) \right] d\tau. \quad (1-47)$$

Ahora, con  $\rho_{n,m}$  se calculan las trazas en la ecuación 1-45 para el baño  $L$ , la expresión obtenida será equivalente para el baño  $R$ ; además, al estar en equilibrio térmico, los estados del sistema corresponden al estado de Gibbs, se tiene que

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B [\lambda_L \rho_{n,m} B_L] &= -i \lambda_L \sum_p \int_0^t e^{-i E_{n,m}(t-\tau)} \left[ \langle B_L^\dagger(t) B_L(\tau) \rangle_{T_L} \sigma_{p,m}(t) A_{n,p} \right. \\ &\quad \left. - \langle B_L^\dagger(t) B_L(\tau) \rangle_{T_L} \sigma_{n,p}(t) A_{p,m} \right]. \end{aligned} \quad (1-48)$$

Donde  $\langle B_\nu^\dagger(t)B_\nu(\tau) \rangle_{T_\nu} \equiv \text{Tr}_B [\rho_\nu B_\nu^\dagger(t)B_\nu(\tau)]$  como las funciones de correlación de cada baño. Aquí se omiten los términos mezclados ya que los baños no interactúan entre sí, por tanto, no se correlacionan. Dado que en el acoplamiento débil las coherencias pueden despreciarse, se prescindirá de los términos no diagonales; además, usando de nuevo la aproximación de Markov haciendo  $x = t - \tau$ , se extenderá la integral hasta infinito. Con esto la ecuación 1-48 se transforma en

$$\text{Tr}_B [\lambda_L \rho_{n,m} B_L] \approx -i\lambda_L \int_0^t e^{-iE_{n,m}(x)} \left[ \langle B_L^\dagger(x)B_L(0) \rangle_{T_L} \sigma_{m,m}(t) A_{n,m} - \langle B_L^\dagger(x)B_L(0) \rangle_{T_L} \sigma_{n,n}(t) A_{n,m} \right]. \quad (1-49)$$

De manera similar se encuentra

$$\text{Tr}_B [\lambda_L \rho_{m,n} B_L] \approx -i\lambda_L \int_0^t e^{-iE_{n,m}(x)} \left[ \langle B_L^\dagger(x)B_L(0) \rangle_{T_L} \sigma_{m,m}(t) A_{n,m} - \langle B_L^\dagger(x)B_L(0) \rangle_{T_L} \sigma_{n,n}(t) A_{n,m} \right]. \quad (1-50)$$

Se introducen ambas ecuaciones en 1-45, y finalmente se llega a

$$J = -\frac{1}{2} \sum_{n>m} E_{n,m} |A_{n,m}|^2 [P_n \gamma_{n \rightarrow m}^L(T_L) - P_m \gamma_{m \rightarrow n}^L(T_L)] + \frac{1}{2} \sum_{n>m} E_{n,m} |A_{n,m}|^2 [P_n \gamma_{n \rightarrow m}^R(T_R) - P_m \gamma_{m \rightarrow n}^R(T_R)]. \quad (1-51)$$

Aquí,  $\gamma_{n \rightarrow m}^\nu(T_\nu)$  es la tasa de transición de probabilidad para cada baño. Como se dijo anteriormente el estado estacionario se usa el hecho que  $\dot{P}_n(t) = 0$  para encontrar las poblaciones de cada nivel de energía. Teniendo en cuenta esto y usando la ecuación 1-51, es posible obtener la corriente que existe entre cada baño y el sistema central en términos de las tasas de transición de probabilidad [7, 3]:

$$J(E_{n,m}, T_R, T_L) = \frac{E_{n,m} (n_L(E_{n,m}, \mu_L) - n_R(E_{n,m}, \mu_R))}{(1 - n_L(E_{n,m}, \mu_L))/\gamma_L(E_{n,m}, T_L) + (1 - n_R(E_{n,m}, \mu_R))/\gamma_R(E_{n,m}, T_R)} \quad (1-52)$$

Aquí,  $n_\nu(h) = [1 + e^{(h-\mu)\beta_\nu}]^{-1}$  es la distribución de Fermi-Dirac,  $\mu$  como el potencial químico y  $\beta_\nu = 1/T_\nu$  el inverso de la temperatura en cada reservorio. En esta ecuación, la corriente es tomada positiva cuando el flujo va de  $L$  a  $R$ . La ecuación 1-52 depende de las tasas de transición, por esta razón, analizar el comportamiento de las tasas permite entender el comportamiento de la corriente y la rectificación.

### 1.3.3. Corriente para sistemas de varios qubits acoplados a baños térmicos

Como se ha dicho anteriormente, en esta tesis se estudiaron dos configuraciones. En esta sección, se describe cómo se obtuvo la corriente para una configuración que se compone

de un sistema central que puede estar compuesto por uno o mas qubits, cada uno acoplado débilmente a un reservorio térmico. El Hamiltoniano total ( $H_T$ ) del sistema estará compuesto por:

$$H_T = H_S + H_B + H_I \quad (1-53)$$

Aquí,  $H_s$  es el Hamiltoniano del sistema central y dependerá del dispositivo que se modele, diodo o transistor. Dado que no es un sistema aislado, cada qubit interactúa con el medio que lo rodea; los reservorios son una colección infinita de bosones, por lo tanto, la interacción entre cada qubit y su respectivo reservorio es de tipo espín-bosón. El Hamiltoniano de cada cual se expresa como sigue.

$$H_B = \sum_{p,k} \omega_k a_k^{p\dagger} a_k^p \quad (1-54)$$

$$H_I = \sum_p \sigma_x^p \sum_k g_k \left( a_k^{p\dagger} + a_k^p \right) \quad (1-55)$$

Donde  $H_B$  el Hamiltoniano de los reservorios y  $H_I =$  el Hamiltoniano de Interacción. La dinámica de este sistema se encuentra determinada por la ecuación de Lindblad descrita en 1-20. En este caso  $H_{LS} = \sum_{p,\omega} s_p(\omega) A_p^\dagger(\omega) A_p(\omega)$  es llamado Hamiltoniano de Lamb Shift, donde  $\omega$  son las energías mayores o iguales a cero en  $H_s$  y  $A_p(\omega) = \sum_{i,j;\omega=\epsilon_j-\epsilon_i} |i\rangle\langle i| \sigma_x^p |j\rangle\langle j|$ . Finalmente, el termino de disipación  $\mathcal{D}_p[\rho]$  se escribe como:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_p[\rho] = \sum_{\omega \geq 0} \mathcal{S}(\omega) \left[ (1 + n_\omega^p) \left( A_p(\omega) \rho A_p^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ \rho, A_p^\dagger(\omega) A_p(\omega) \} \right) \right. \\ \left. + n_\omega^p \left( A_p^\dagger(\omega) \rho A_p(\omega) - \frac{1}{2} \{ \rho, A_p(\omega) A_p^\dagger(\omega) \} \right) \right], \quad (1-56) \end{aligned}$$

aquí,  $\mathcal{J}(\omega) \propto \omega$  es la densidad espectral de tipo Ohmico para los reservorios.  $n_\omega^p = [e^{\omega/T_p} - 1]^{-1}$  es la distribución de Bose-Einstein, con  $k_B = \hbar = 1$ . En la ecuación 1-56,  $[H_s + H_{LS}, \rho] = 0$  dado que el conmutador entre  $H_S$  y  $A_p^\dagger(\omega) A_p(\omega)$  es cero [45]. Usando la definición de la ecuación 1-39 y considerando la ecuación maestra expresada en 1-20:

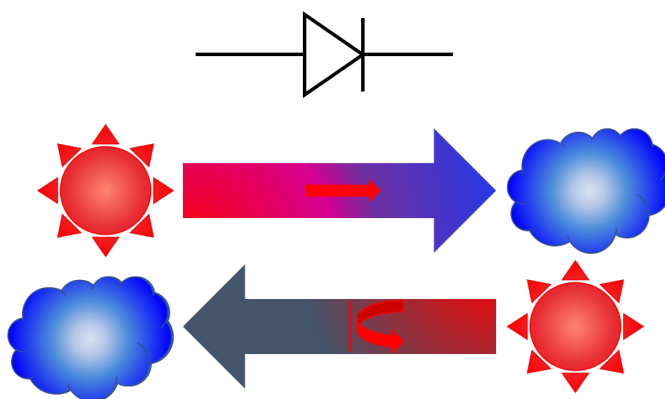
$$J_p = \text{Tr}(\mathcal{D}_p[\rho] H_s) \quad (1-57)$$

En el estado estacionario  $d\rho_S/dt = 0$ , entonces  $\sum_p J_p = 0$ . Lo cual implica que la energía se conserva a lo largo del proceso. Aquí, el disipador  $\mathcal{D}_p$  se convierte en el generador del semigrupo dinámico que evoluciona el estado inicial del operador densidad  $\rho_S$ .

## 1.4. Dispositivos en Termotrónica

### 1.4.1. El Diodo Térmico

El bloque fundamental en la termotrónica, tal como sucede en la electrónica es una configuración que rectifique calor. Este dispositivo es llamado diodo térmico y actúa como un conductor de calor cuando se tiene una polarización térmica positiva, y en sentido contrario es un mal conductor, como muestra la figura 1-3. Para direccionar calor en un sentido



**Figura 1-3.:** Diagrama esquemático de un diodo térmico. La idea fundamental en este tipo de dispositivos es la misma que se tiene en los diodos electrónicos, permitir el flujo de energía en una dirección y bloquearlo totalmente en el sentido contrario.

determinado se requiere encontrar una configuración adecuada que permita esto, por tanto, es conveniente diseñar el diodo de tal manera que aproveche las propiedades de los componentes de forma similar a como se realiza en la electrónica y así encontrar el punto donde la simetría en los flujos de energía se rompe. Siguiendo esta idea de romper la simetría, en el caso de esta tesis se aplicó un campo magnético externo en uno de los reservorios, o también, tener varios subsistemas que posean diferentes propiedades en el transporte de energía térmica [4]. Además de la asimetría en las corrientes, los sistemas estudiados deben poseer otra propiedad como condición suficiente para ser un candidato a dispositivo en termotrónica. Esta propiedad es conocida como Resistividad térmica diferencial negativa o Conductividad térmica diferencial negativa (NDTR y NDTC por sus siglas en inglés, respectivamente). Esta propiedad indica que el flujo de energía en uno de los baños se ve disminuido cuando aumenta la diferencia de temperatura entre ellos. Esta propiedad puede parecer contra-intuitiva, ya que la termodinámica con la ley de Fourier indica que la corriente entre dos cuerpos a diferente temperatura debe aumentar proporcional a la diferencia de temperaturas entre ellos. El factor de rectificación es la medida de cuán efectivo es el diodo para rectificar la corriente térmica, este factor puede ser medido de diversas formas, en esta tesis se usan dos



definiciones de rectificación. La primera usada en las referencias [2, 7]

$$R(\Delta T) = \frac{J(\Delta T) - J(-\Delta T)}{J(\Delta T) + J(-\Delta T)}, \quad (1-58)$$

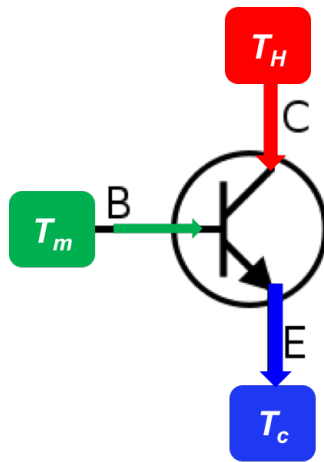
donde  $J$  es la corriente de calor normalizada,  $\Delta T = T_L - T_R$  denota la temperatura “bias”. La convención en este caso indica que  $R(\Delta T) = 0$  en el caso que no exista rectificación y  $|R(\Delta T)| = 1$  en el caso ideal, es decir, el transporte de energía térmica es de  $L$  a  $R$  y se encuentra totalmente bloqueada en dirección contraria. La segunda es una definición de rectificación ligeramente distinta, tomada de las referencias [57, 22, 43].

$$R = \left| \frac{|J_L^+| - |J_L^-|}{\text{Max}(|J_L^+|, |J_L^-|)} \right| \quad (1-59)$$

Aquí,  $J_L^+$  es la corriente en dirección positiva, de la terminal  $L$  a  $R$  y  $J_L^-$  es la corriente en dirección negativa, de  $R$  a  $L$ . Si  $R = 0$ , no hay rectificación y si  $R = 1$ , significa que el flujo de energía fluye en una sola dirección.

### 1.4.2. El transistor térmico

El transistor térmico posee tres elementos, al igual que su equivalente electrónico el transistor bipolar se compone de un emisor, base y colector. Como se observa en la figura 1-4, el efecto transistor se genera cuando pequeños cambios en corriente de la base, produce un incremento considerablemente grande en la corriente del emisor y el colector. En la confi-



**Figura 1-4.:** Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración 2 qubit y dos reservorios

guración propuesta en esta tesis, se usaron tres qubits que pueden estar o no interactuando entre sí, como se aprecia en la figura 1-4. Los qubits que actúan como emisor y colector se encuentran a diferentes temperaturas y la base en una temperatura intermedia a ellas y

es la que controla el flujo de energía que va desde ella hasta el emisor y el colector. Para cuantificar el efecto transistor se define el coeficiente de amplificación térmica, que mide el cambio de las corrientes en el emisor y colector respecto al cambio en la corriente de la base [4].

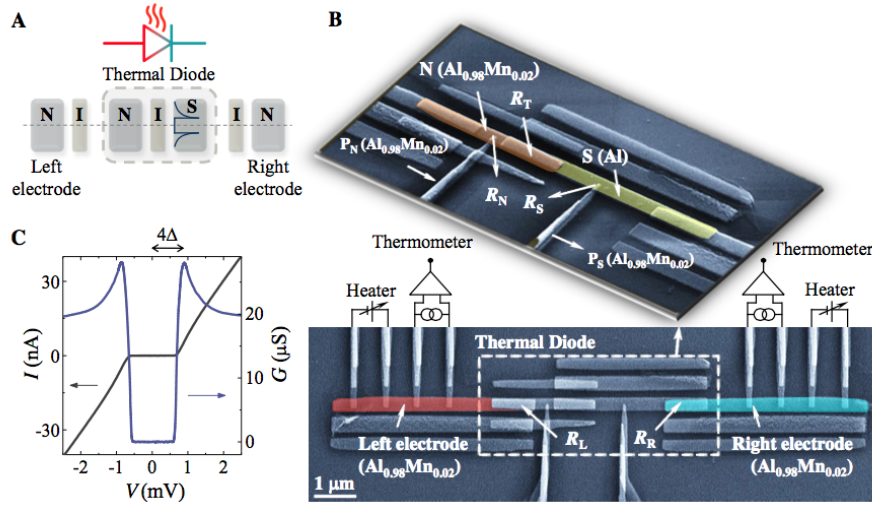
$$\alpha^{L,R} = \frac{\partial J_{L,R}}{\partial J_M} \quad (1-60)$$

Cuando  $\alpha^{L,R} = 0$  no hay amplificación, si  $\alpha^{L,R} = -1$  el crecimiento de la corriente en el emisor(colector) es proporcional a la corriente en la base y si  $\alpha_{L,R} < -1$ , la corriente del emisor(colector) es amplificada. De la ecuación anterior se entiende que existen dos coeficientes de amplificación térmica, uno para la corriente en el qubit  $L$  y otro para  $R$ . Dada la conservación de la energía en este tipo de sistemas  $J_L + J_R = -J_M$ , se espera que  $\alpha^L + \alpha^R = -1$ .

## 2. Corriente térmica en un sistema de dos niveles y dos reservorios

El estudio del transporte de energía en nano-sistemas se ha vuelto un “hot topic” en los últimos años gracias al surgimiento de este tipo de sistemas, donde es muy importante las escalas de propiedades cuánticas como la decoherencia y termalización, ya que esto revela comportamientos cuánticos en el sistema [58, 32]. A partir de este tipo de configuraciones se ha dado paso a una serie de dispositivos que funcionan y pueden ser controlados a partir del flujo de calor como las máquinas térmicas cuánticas [35, 34, 42, 59, 60]; también en procesamiento de información y computación [18] y sistemas moleculares basados en transporte termoeléctrico [61, 56, 32]. Hay esfuerzos que se han enfocado en el transporte de energía en sistemas compuestos por diferentes materiales, llamados sistemas híbridos. Este tipo de arreglos maximizan las propiedades del sistema para lograr altos factores de rectificación [52, 62, 63, 7, 17, 5, 15, 64]. Actualmente, existen diversas propuestas teóricas de dispositivos termotrónicos como transistores térmicos y compuertas lógicas [20, 4, 21, 31, 30]. Estas propuestas usan configuraciones que combinan diferentes materiales como metales y semiconductores. Jiang et al. [21] modela teóricamente rectificadores y transistores a partir de arreglos de puntos cuánticos sintonizables embebidos en hilos. También, en la referencia [65] modelaron teóricamente un switch térmico usando qubits superconductores y campos magnéticos como parámetro de switcheo y control de la corriente térmica.

Aunque la primera evidencia experimental data de 2006 con el trabajo de Chang [66], recientemente, Martínez et al. [8] realizaron experimentalmente un diodo termoeléctrico usando un subsistema central compuesto por metales y superconductores, interactuando con baños metálicos, mostrando un gran factor de rectificación. En este experimento, el diodo térmico fue fabricado por litografía con haz de electrones y se comprende de tres bloques. Dos bloques compuestos por un metal-aislante (NI) en los extremos izquierdo y derecho, y en el centro, se encuentra el diodo térmico constituido por un arreglo metal-aislante-superconductor (NIS), como muestra la figura **2-1**. El bloque NIS presenta un acoplamiento asimétrico entre sus componentes, junto con el gap del superconductor en presencia de un gradiente de temperatura entre los extremos que hace las veces de baños térmicos, ocasionando que la corriente tome una dirección preferencial. Cuando la diferencia de temperaturas entre los baños es de alrededor de  $50mK$ , se presenta el factor de rectificación más alto. Cottrill et al. [67]



**Figura 2-1.:** Realización experimental de un diodo térmico híbrido. Tomado de [8]

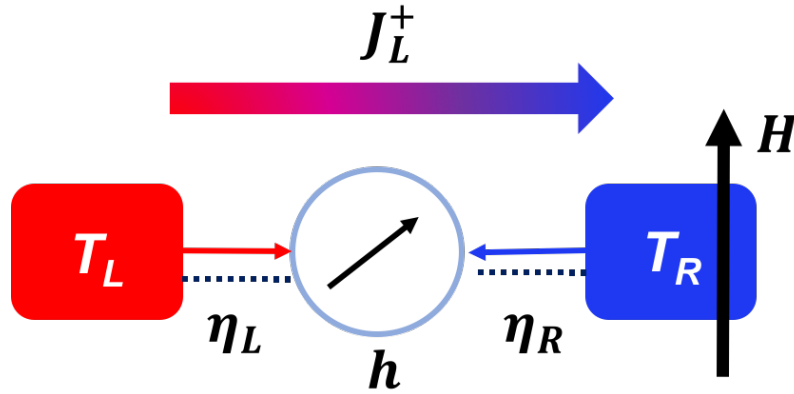
presentaron evidencia experimental de un diodo térmico basado en materiales a temperatura ambiente, logrando altos factores de rectificación. Este resultado se debe a la unión de dos materiales con temperatura de cambio de fase cercanas, pero con conductividad térmica opuesta. Otras referencias de tipo experimental [29, 25, 26], muestran la viabilidad de las propuestas teóricas de sistemas compuestos por materiales con diferentes propiedades de transporte térmico como una alternativa para encontrar la asimetría que garantiza la rectificación.

Este capítulo desarrolla teóricamente la idea de tener diodos térmicos usando la asimetría en la densidad de estados de los baños, teniendo la posibilidad de tener materiales metálicos o aislantes. Además, se introduce una asimetría adicional sometiendo uno de los baños térmicos a un campo Zeeman. La idea de tener un qubit acoplado a un baño con campo ha sido explorada en referencias [68, 69, 70], aunque con preguntas/intereses muy diferentes al nuestro. Por ejemplo, [70] estudiaron el proceso de decoherencia de un espín  $1/2$  acoplado a un baño de electrones que se encuentra en la banda de conducción en metales o semiconductores. Encontraron que la decoherencia en el espín es mucho más rápida cuando se trata de un metal que de un semiconductor. En la sección 2.1, se describe el modelo resuelto: un sistema de dos niveles acoplados a dos baños térmicos que no interactúan y se sometió uno de ellos a la influencia de un campo Zeeman en dirección  $z$ , resultando en una dependencia de las tasas de transición de probabilidad con el campo externo aplicado. La sección 2.2 se refiere al análisis de las tasas de transición de probabilidad encontradas en la sección anterior, mostrando que su comportamiento depende explícitamente del tipo de baño que se tiene y de la aplicación del campo externo. La sección 2.3 describe las propiedades de la corriente

y rectificación térmica en la primera configuración de candidato a diodo térmico, en la cual se usan dos baños aislantes. La sección 2.4 describe las propiedades de una configuración con dos baños metálicos. En ambas configuraciones se introduce la asimetría aplicando el campo externo en el baño derecho. La sección 2.5 estudia la configuración metal-aislante, con campo externo aplicado en el extremo derecho. En las tres configuraciones se logra obtener el máximo factor de rectificación. Este resultado, combinado con el resultado obtenido para NDTC, garantiza que las configuraciones propuestas son buenas candidatas a dispositivos termotrónicos. Finalmente, la sección 2.6 enuncia las conclusiones y perspectivas del trabajo realizado.

## 2.1. Modelo

El sistema físico considerado está compuesto por un sistema central y dos reservorios electrónicos que no interactúan entre sí, como se muestra en la figura 2-2. Este sistema físico usado



**Figura 2-2.:** Diagrama esquemático del sistema estudiado, donde  $\eta_\nu$  es la fuerza de acoplamiento entre cada baño y el subsistema.  $J_+$  define el sentido positivo del flujo de energía del baño  $L$  al  $R$  y  $H$  es el campo magnético aplicado en el baño derecho.

en este capítulo representa un sistema  $h$  de dos niveles acoplado a dos reservorios fermiónicos, como se explicó en la sección 1.2, dónde se habló de sistemas cuánticos abiertos. El Hamiltoniano del sistema completo se expresa cómo:

$$\begin{aligned} H &= H_s + H_B^L + H_B^R + H_I^L + H_I^R \\ &= h\sigma_z^c + \sum_{k,\alpha} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \sum_{l,\beta} \epsilon_{l\beta} c_{l\beta}^\dagger c_{l\beta} + \sigma_p \cdot V_L + \sigma_p \cdot V_R. \end{aligned} \quad (2-1)$$

Donde  $H_s$  es el Hamiltoniano del sistema central con  $h$  como la diferencia de energía entre los dos niveles en el qubit.  $H_B^\nu$  representa el Hamiltoniano de los baños electrónicos  $\nu = R, L$  derecho e izquierdo, respectivamente. Aquí,  $c_{l\alpha}^\dagger$  ( $c_{l\beta}^\dagger$ ) y  $c_{l\alpha}$  ( $c_{l\beta}$ ) son los operadores de creación

y aniquilación respectivamente, para el espín  $\alpha(\beta)$  con número de onda  $k(l)$ . Finalmente,  $H_I^\nu$  denota el Hamiltoniano de interacción que existe entre el subsistema central y los reservorios derecho e izquierdo, con

$$\mathbf{V}_{R,L} = \eta_{R,L} \sum_{k,p,\alpha,\beta} c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} c_{p\beta}. \quad (2-2)$$

Aquí,  $\eta_\nu$  es la fuerza o intensidad de acoplamiento con cada baño y por simplicidad en los cálculos, se tomaron iguales. Este Hamiltoniano de interacción es conocido como el acople tipo Kondo. El operador  $\mathbf{V}_{R,L}$  depende de la componente de espín que se acople y es proporcional a la densidad de espín  $\mathbf{S}$ , por lo tanto, este puede tener tres componentes

$$\begin{aligned} V_x &= \eta \mathbf{S}_x = \eta \sum_{k,k'} \left( c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow} + c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} \right), \\ V_y &= \eta \mathbf{S}_y = i\eta \sum_{k,k'} \left( c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow} - c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} \right), \\ V_z &= \eta \mathbf{S}_z = \eta \sum_{k,k'} \left( c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} \right). \end{aligned} \quad (2-3)$$

La componente de espín escogida a lo largo del desarrollo de esta tesis fue la componente  $x$ , la componente a lo largo del eje  $z$  fue explorada pero su resultado fue trivial. El acoplamiento en este caso es de tipo Ising con  $\sigma_\alpha = \sigma_\beta = \sigma_x$ . Adicionalmente, se mencionó que al menos uno de los baños estará sometido a un campo Zeeman  $H$  en la dirección  $z$ , este campo afecta los niveles de energía del baño, así:

$$\epsilon_{k\alpha} = \epsilon_k + \alpha H, \quad (2-4)$$

con  $\alpha = \pm 1$ , denota la dirección del espín en el sistema central.

### Dinámica asintótica

Como se dijo en la sección 1.1.4, un TLS en el estado asintótico es llevado al equilibrio térmico y allí, las coherencias del sistema desaparecen y la dinámica solo dependerá de las poblaciones de los niveles. Con la intención de encontrar la dinámica asintótica del sistema central estudiado, se partió de la ecuación maestra de Born-Markov expresada en 1-9. Se expande el conmutador y se traza sobre los grados de libertad del baño para llegar a

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = - \int_0^\infty ds \sum_{\alpha,\beta} (C_{\alpha\beta}(s) [\sigma_\alpha(t), \sigma_\beta(t-s) \rho_s(t)] + C_{\alpha\beta}(-s) [\sigma_\beta(t-s) \rho_s(t), \sigma_\alpha(t)]). \quad (2-5)$$

En esta ecuación,  $C_{\alpha\beta}(s) = \langle V_\alpha^\dagger(t) V_\beta(t-s) \rangle$  son las funciones de correlación del baño a dos tiempos. Dado que el sistema central es un sistema de dos niveles, está caracterizado por las

etiquetas  $|e\rangle$  para el estado excitado y  $|g\rangle$  para el estado base. Usando  $\langle e|\rho_S|e\rangle = P_e$  como la probabilidad de transición en el estado  $|e\rangle$  y expandiendo los conmutadores, se parte de la ecuación 2-5 para calcular  $P_e$ ,

$$\begin{aligned} \dot{P}_e(t) = & - \int_0^\infty ds \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}(s) (\langle e | \sigma_\alpha(t) \sigma_\beta(t-s) \rho_s(t) | e \rangle - \langle e | \sigma_\beta(t-s) \rho_s(t) \sigma_\alpha(t) | e \rangle) \\ & - \int_0^\infty ds \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}(-s) (\langle e | \rho_s(t) \sigma_\beta(t-s) \sigma_\alpha(t) | e \rangle - \langle e | \rho_s(t) \sigma_\alpha(t) \sigma_\beta(t-s) | e \rangle). \end{aligned} \quad (2-6)$$

Usando la relación

$$e^{-i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}_p} (\vec{a} \cdot \vec{\sigma}_p) e^{i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}_p} = \cos(\theta) (\vec{a} \cdot \vec{\sigma}_p) + \sin(\theta) (\vec{n} \times \vec{a}) \cdot \sigma_p + (1 - \cos(\theta)) (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}_p) (\vec{n} \cdot \vec{a}), \quad (2-7)$$

la ecuación 2-6 se transforma en:

$$\dot{P}_e(t) = - \sum_\nu \int_0^\infty ds [ C_{xx}(s) ( P_e(t) e^{2ihs} - P_g(t) e^{-2ihs} ) + C_{xx}(-s) ( P_e(t) e^{-2ihs} - P_g(t) e^{2ihs} ) ]. \quad (2-8)$$

Reagrupando, se obtiene que:

$$\dot{P}_e(t) = - \sum_\nu [ P_e(t) \Gamma_{g \rightarrow e}(h) - P_g(t) \Gamma_{e \rightarrow g}(h) ], \quad (2-9)$$

donde:

$$\Gamma_{e \rightarrow g}(h) = \int_0^\infty ds C_{xx}(s) e^{2ihs} + \int_0^\infty ds C_{xx}(-s) e^{-2ihs} \quad (2-10)$$

Esta última expresión denota la tasa de transición a la cual el sistema central distribuye la probabilidad de transición en los dos niveles disponibles. Además,  $\Gamma_{e \rightarrow g}(h)$  proviene de la parte imaginaria de las llamadas autoenergías  $\Sigma_{\alpha,\beta}(z)$  en el espacio de Laplace. Estas autoenergías son útiles si se quisiera encontrar toda la dinámica del sistema, así como para entender el comportamiento markoviano de la misma. Para que la ecuación 2-8 sea una ecuación maestra, debe re-escribirse realizando un cambio de variable, teniendo en cuenta que los valores para  $\Gamma_{g \rightarrow e}(h)$  deben ser definidos positivos. Se descompone la tasa de transición en una parte anti-hermítica  $S_{g \rightarrow e}^\nu(h)$  y otra hermítica, así

$$\begin{aligned} \gamma_{g \rightarrow e}^\nu(h) &= \Gamma_{g \rightarrow e}(h) + \Gamma_{e \rightarrow g}^*(h) \\ &= \int_{-\infty}^\infty ds C_{xx}(s) e^{2ihs}. \end{aligned} \quad (2-11)$$

Aplicando esto mismo para  $\Gamma_{e \rightarrow g}(h)$  se llega a

$$\gamma_{e \rightarrow g}^\nu(h) = \int_{-\infty}^\infty ds C_{xx}(-s) e^{2ihs}. \quad (2-12)$$

Finalmente la ecuación 2-9 se transforma en

$$\dot{P}_e(t) = - \sum_{\nu} [ P_e(t)\gamma_{g \rightarrow e}^{\nu}(h) - P_g(t)\gamma_{e \rightarrow g}^{\nu}(h) ] . \quad (2-13)$$

Esta expresión tiene la misma forma de 1-26, por lo tanto, esta ecuación representa la ecuación maestra de Pauli para el problema específico tratado en este capítulo. Vale resaltar que la forma de esta ecuación implica que resolver la dinámica del sistema significa encontrar el cambio de la probabilidad de encontrar el sistema en el estado  $|e\rangle$  en el tiempo  $t$ , además, este cambio depende directamente de la diferencia entre las probabilidades de encontrarse en cada estado posible en ese tiempo, y recordando la sección 1.3, esta interpretación permite concluir que al resolver la dinámica mediante esta ecuación, se está encontrando el intercambio de calor en el sistema en el tiempo  $t$ . Usando esta ecuación, también es posible entender cómo las condiciones iniciales y otros parámetros influyen en el régimen transiente y modifican la corriente en el estado asintótico, esto se ha dejado como trabajo a futuro.

Es evidente que la componente fundamental en la ecuación 2-13 son las tasas de transición de probabilidad, dado que en ellas esta contenida toda la información de la interacción entre los baños y el subsistema y la influencia del campo externo aplicado. Por lo tanto, es necesario conocer la expresión explícita de las funciones de correlación  $\langle V_x(s)V_x(0) \rangle$  en el cuadro de interacción donde el operador  $V_x(s) = e^{iH_B s} \sum_{k,k'} (c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k'\uparrow} + c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k'\downarrow}) e^{-iH_B s}$ . Con esto, se obtiene que

$$\begin{aligned} \langle V_x(s)V_x(0) \rangle &= \eta^2 \langle e^{iH_B s} \sum_{k,k'} (c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k'\uparrow} + c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k'\downarrow}) e^{-iH_B s} \sum_{l,l'} (c_{l\downarrow}^{\dagger} c_{l'\uparrow} + c_{l\uparrow}^{\dagger} c_{l'\downarrow}) \rangle \\ &= \eta^2 \sum_{k,k',l,l'} \left[ e^{i(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k\downarrow})s} \langle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k'\downarrow} c_{l\uparrow}^{\dagger} c_{l'\downarrow} \rangle + e^{i(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k\downarrow})s} \langle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k'\downarrow} c_{l\downarrow}^{\dagger} c_{l'\uparrow} \rangle \right. \\ &\quad \left. + e^{i(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k\uparrow})s} \langle c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k'\uparrow} c_{l\uparrow}^{\dagger} c_{l'\downarrow} \rangle + e^{i(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k\uparrow})s} \langle c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k'\uparrow} c_{l\downarrow}^{\dagger} c_{l'\uparrow} \rangle \right] \end{aligned} \quad (2-14)$$

Como se observa, esta función de correlación involucra operaciones con cuatro operadores que deben ser resueltas usando el teorema de Wick. Este teorema permite reducir la combinación de operadores creación y aniquilación. Usando también las relaciones de conmutación y anti-conmutación para fermiones, se llega a

$$\langle V_x(s)V_x(0) \rangle = e^{i(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k\downarrow})s} n_{k\uparrow} (1 - n_{k\downarrow}) + e^{i(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k\uparrow})s} n_{k\downarrow} (1 - n_{k\uparrow}). \quad (2-15)$$

Aquí,  $n_{k\uparrow} = c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow}$  ( $n_{k\downarrow} = c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}$ ) es el operador número. Ahora con la expresión para la función de correlación, se introduce la ecuación 2-15 en la ecuación 2-11 y usando además 2-4, se obtiene la expresión final para las tasas de transición de probabilidad

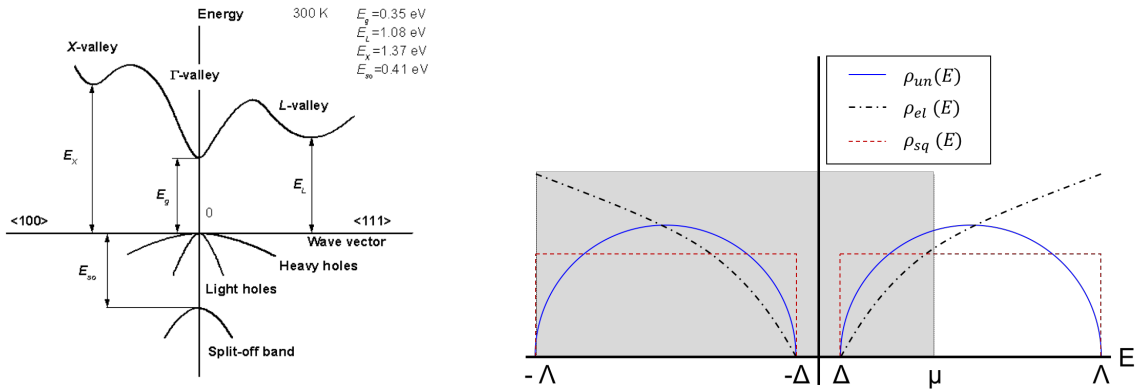
$$\gamma_{e \rightarrow g}(h, T, H) = 2\pi \sum_{\alpha=\pm, \nu} \eta_{\nu}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho(E) \rho(E + 2(h + \alpha H)) n(E + \alpha H) (1 - n(E + 2h + \alpha H)). \quad (2-16)$$



Aquí,  $n(E) = (1 + e^{(E-\mu)/k_bT})^{-1}$  es la distribución de Fermi-Dirac con  $\mu$  como el potencial químico y  $\rho(E)$  es la densidad de estados, la cual determina el número de estados posibles en un intervalo de energía por unidad de volumen, en función de la energía disponible [71]. En esta tesis, se consideraron modelos simples para describir las densidades de estado que serán llamados: densidad uniforme, raíz cuadrada y elíptica

$$\begin{aligned}\rho_{un}(E) &= \frac{1}{2(\Delta - \Delta)} \sqrt{|E| - \Delta} \Theta(|E| - \Delta) \Theta(\Lambda - |E|), \\ \rho_{sq}(E) &= N \sqrt{|E| - \Delta} \Theta(|E| - \Delta) \Theta(\Lambda - |E|), \\ \rho_{el}(E) &= N' \left( \frac{(\Lambda - \Delta)^2}{4} - \left( |E| - \frac{(\Lambda + \Delta)^2}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2}},\end{aligned}\tag{2-17}$$

respectivamente. Aquí,  $N = \frac{3}{4} (\Delta - \Lambda)^{-3/2}$  y  $N' = \frac{16}{3\pi} N (\Delta + \Lambda)^{-1/2}$  son factores de normalización para cada DOS,  $\Delta$  es el intervalo de energía o gap y  $\Lambda$  es la frecuencia de corte. En las referencias [7, 70] usaron la densidad elíptica y [72] usó también la raíz cuadrada mostrando que los resultados obtenidos no cambian. La densidad de estados es una función que representa las bandas de valencia y conducción, en esta tesis se usó la densidad raíz cuadrada, como se observa en la figura 2-3. Las DOS descritas anteriormente corresponden



**Figura 2-3.:** Ejemplo de la estructura de bandas reales para un semiconductor y modelos de densidad de estados. La figura (a) Estructura de bandas para el InAs, tomado de [9] y la figura (b) Densidades de estados  $\rho_{un}$ ,  $\rho_{el}$ ,  $\rho_{sq}$  como una función de la energía  $E$ , si  $\mu > \Delta$  se trata de un metal y si  $\mu < \Delta$  es un aislante.

a semiconductores intrínsecos, los cuales no contienen impurezas y tienen dos bandas: la banda de valencia y la de conducción separadas por un intervalo o gap de  $2\Delta$ . Comúnmente, los semiconductores tienen formas más complejas, como se observa en la figura 2-3(a); este modelo representa semiconductores con gap directo. Los valores típicos para  $\Delta$  para semiconductores según el instituto Ioffe [9] es de 1.12eV para el Silicio, de 0.661eV para el

Germanio y de 0.35eV para InAs. Los valores típicos para  $\Lambda$  son de  $10\Delta$ . En este modelo, la DOS representa un aislante o semiconductor si el potencial químico es menor que el gap  $\mu < \Delta$  y representa a un metal cuando  $\mu > \Delta$ . A lo largo de este capítulo se usó la densidad raíz cuadrada. Con esto, la ecuación 2-16 queda

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_{e \rightarrow g}(h, H, T)}{2\pi\eta^2} &= N^2 \sum_{\alpha=\pm} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sqrt{|E| - \Delta} \Theta(|E| - \Delta) \Theta(\Lambda - |E|) \\ &\times \sqrt{|E + 2(h + \alpha H)| - \Delta} \Theta(|E + 2(h + \alpha H)| - \Delta) \Theta(\Lambda - |E + 2(h + \alpha H)|) \\ &\times n(E + \alpha H) (1 - n(E + 2h + \alpha H)). \end{aligned} \quad (2-18)$$

De forma analítica, esta tasa puede ser resuelta cuando  $T = 0K$  y puede verse explícitamente la influencia del campo magnético externo. Dada su forma, la tasa se expande en dos términos, uno para el campo externo positivo ( $H_+$ ) y otro negativo ( $H_-$ ) y también, el valor absoluto en la DOS divide a su vez la integral en dos dominios; entonces, dependiendo de  $H$ , el gap  $\Delta$  y el potencial químico  $\mu$ , las regiones se cruzarán entre sí y la integral se convierte en una función por tramos, como se mostrará mas adelante.

Dado que el objetivo de esta tesis se centra en el estudio de la corriente y la rectificación para el diseño de dispositivos capaces de direccionar calor, es pertinente encontrar la expresión en el estado asintótico para la corriente. Siguiendo un proceso similar al descrito en la sección 1.3.2, se llega a la expresión:

$$J(h, H, T_R, T_L) = \frac{h(n_L(h, \mu_L) - n_R(h, \mu_R))}{(1 - n_L(h, \mu_L))/\gamma_L(h, H, T_L) + (1 - n_R(h, \mu_R))/\gamma_R(h, H, T_R)}. \quad (2-19)$$

Aquí, la diferencia de energía entre niveles es determinada por la energía característica del qubit  $h$ . Como se puede observar en 2-19, la corriente está determinada por las tasas de transición de ambos baños, que serán calculadas con la expresión 2-18, así como también depende de la ocupación térmica y la frecuencia característica del qubit. Es evidente que en la variación de estos parámetros está la clave para alcanzar la asimetría necesaria para encontrar altos factores de rectificación. Las tasas expresadas en 2-18 contienen la información sobre la estructura de los baños y la dependencia explicita con el campo externo aplicado, por lo tanto, conocer el comportamiento de las tasas es fundamental para entender el comportamiento de la corriente. En el régimen transiente del sistema, la dinámica es descrita por las ecuaciones que surgen desde el formalismo de los operadores de proyección de Nakajima-Zwanzig [45]. Al obtener el operador densidad en este régimen, también es posible calcular la corriente. Este cálculo es mucho más complicado e implica encontrar las autoenergías del sistema, mencionadas anteriormente. En el anexo A se muestran las autoenergías para este problema.

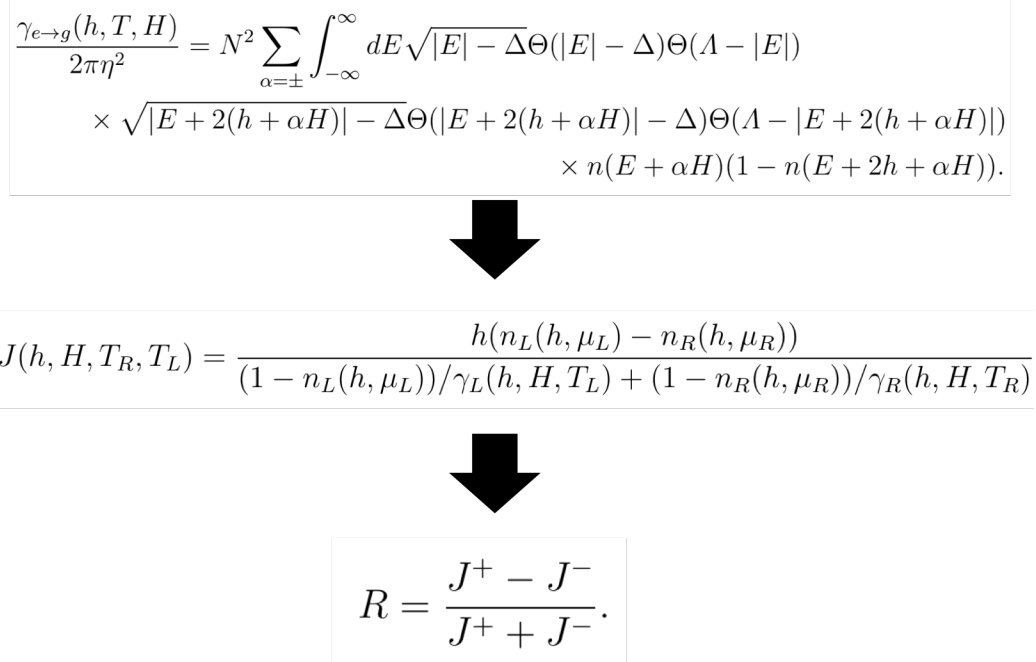
Finalmente, tal como se explicó en la sección 1.4.1 el factor de rectificación es la medida de cuán efectivo es el diodo para rectificar la corriente térmica, este factor puede ser medido de

diversas formas, en este caso se usó la definición propuesta por [2, 7]

$$R = \frac{J^+ - J^-}{J^+ + J^-}. \quad (2-20)$$

Donde  $J$  es la corriente de calor normalizada,  $\Delta T = T_L - T_R$  denota la temperatura “bias”. La convención en este caso indica que  $R = 0$  en el caso que no exista rectificación y  $R = 1$  en el caso ideal, es decir, el transporte de energía térmica es de  $L$  a  $R$  y se encuentra totalmente bloqueada en dirección contraria.

En la figura 2-4 se resume el proceso de análisis para los dispositivos propuestos en este capítulo. En las configuraciones que se presentan, la simetría en los baños se modificó va-



**Figura 2-4.:** Diagrama esquemático de los pasos a seguir para el análisis de cada dispositivo

riando parámetros como el potencial químico y el campo externo aplicado. A continuación, se examina el comportamiento de las tasas de transición para los casos donde el baño es un aislante con un gap definido por la variable  $\Delta = 0.1\Lambda$ , eso quiere decir que  $\mu = 0\Lambda$ . También, se examina en el caso donde el baño es metálico, con  $\mu = 0.18\Lambda$ .

## 2.2. Tasas de Transición de Probabilidad

Como se dijo en la sección pasada, el cálculo y análisis de las tasas de transición de probabilidad facilita la comprensión del comportamiento de la corriente y por tanto de la rectificación. En esta sección, se describe el comportamiento de la tasa de transición en función

de la energía característica del qubit  $h$ ; así como el comportamiento de la misma en función de la temperatura del baño  $T_\nu$  para diferentes baños. Para los gráficos presentados a continuación, se tomó un gap o diferencia entre bandas de  $\Delta = 0.1\Lambda$  y el cutoff como  $\Lambda = 1\text{eV}$ . Las unidades son relativas a los valores típicos para los gaps en los semiconductores, como se dijo anteriormente. El campo aplicado se encuentra en unidades del cutoff, donde  $1\text{eV}$  equivale a  $398\text{T}$  en el caso del InAs, o de  $1088\text{T}$  para el GaAs. En el caso de esta tesis es  $h \ll T_\nu$ , ya que en el caso contrario, debe ser usado el formalismo de Born-Oppenheimer debido a los efectos de co-tunelamiento [73]. También,  $T_\nu \ll \Delta$ , debido que a temperaturas elevadas los baños metálicos y aislantes tienen el mismo comportamiento y no se distinguiría su naturaleza.

### 2.2.1. Baño Aislante

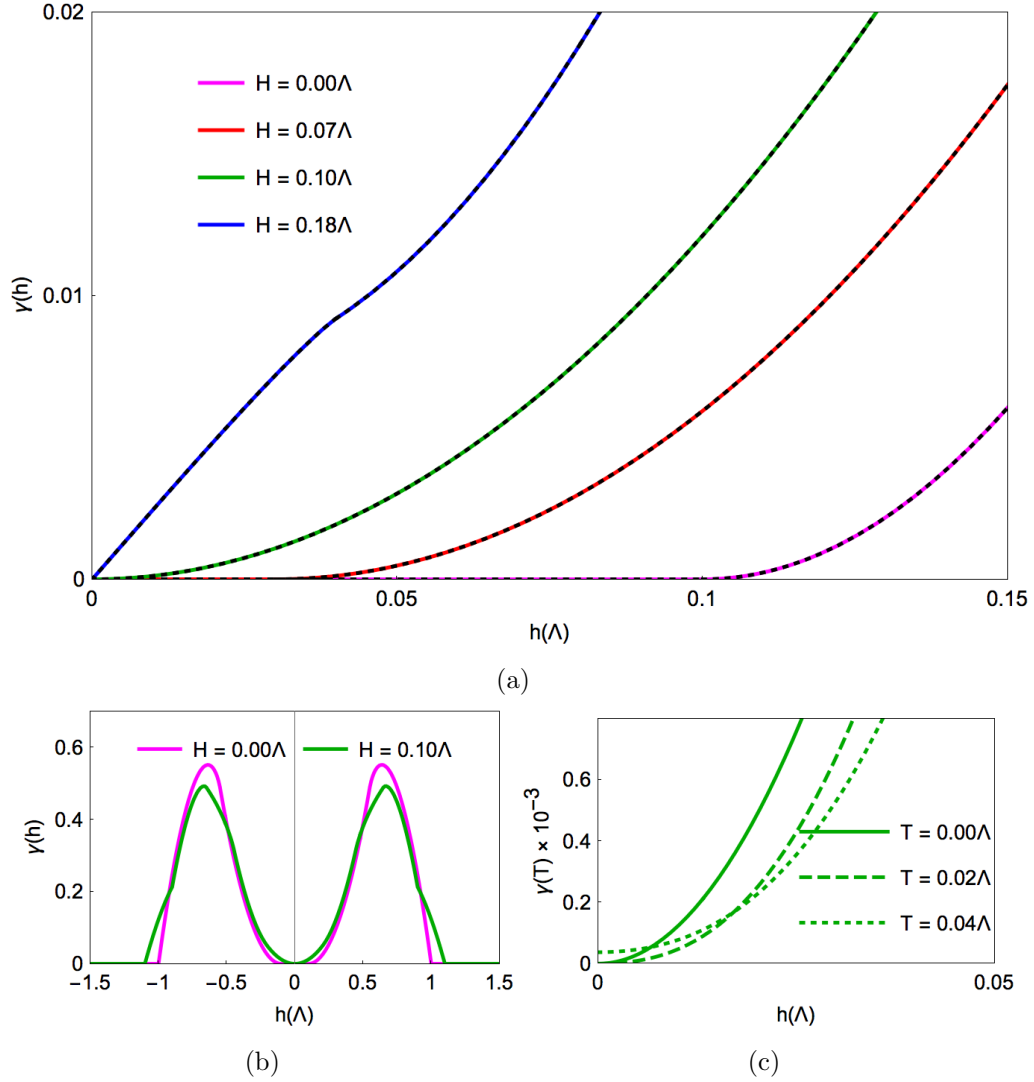
#### Temperatura cero

La descripción de la tasa en términos de  $h$  es necesaria para determinar los cambios que se presentan en el régimen de interés. Debido a esto, conocer el comportamiento de las tasas en el régimen de interés es importante, facilitando la comprensión del comportamiento de la corriente y la rectificación. La figura 2-5(a) muestra el cambio de la tasa de transición a medida que se aumenta la frecuencia  $h$  del qubit, con diferentes valores de campo aplicado cuando el baño se considera aislante, es decir tiene potencial químico  $\mu = 0\Lambda$ . Cada curva representa dicha tasa de transición a un campo  $H$  diferente y al incrementar su valor, la tasa tiene una magnitud mayor. Se observa que para todo  $H$  la tasa es cero para  $h = 0$ , esto indica un comportamiento no markoviano en el sistema. A continuación, se describe el comportamiento de la tasa en las regiones  $H \leq \Delta$  y  $H > \Delta$ :

- Intervalo  $H \leq \Delta$ :** Se observa que la tasa presenta un gap entre  $0 < h < \Delta$  como se espera para un aislante, ya que el gap en la DOS genera también un gap  $\Delta$  en la tasa. Cuando aumenta el campo en la curva roja, se observa cómo el gap ha disminuido en comparación con la curva magenta. Luego, la curva verde muestra que el gap ha desaparecido completamente. Esta reducción del campo indica que este privilegia el transporte de energía. En este caso donde  $T = 0$ , fue posible obtener una solución analítica a partir de la integración de la ecuación 2-18. La tasa tiene una forma parabólica en  $h$

$$\frac{\gamma(h, 0, H)}{N^2} \approx \frac{\pi}{2}(h - \Delta')^2. \quad (2-21)$$

Aquí, el gap de energía disminuye como  $\Delta' = \Delta - H$ . Esta solución analítica está representada por la curva negra punteada sobre cada tasa, mostrando un ajuste exacto entre los cálculos analíticos y numéricos. Este comportamiento parabólico en  $h$  sugiere



**Figura 2-5.:** Tasas de transición de probabilidad para un baño aislante cuando se aplica un campo Zeeman, cada curva representa la tasa a un campo  $H$  diferente. La figura (a) muestra la tasa de transición a medida que aumenta la frecuencia característica  $h$  (en unidades de  $\Lambda$ ) del qubit a  $T = 0\Lambda$ . La figura (b) muestra el comportamiento completo de la tasa de transición de probabilidad en función de  $h$  a  $T = 0\Lambda$ . La figura (c) muestra la tasa de transición de probabilidad para tres diferentes temperaturas, se observa que al aumentar la temperatura  $\gamma \neq 0$  cuando  $h = 0$ , gracias a la activación térmica. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $T = 0\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$

que el sistema se comporta como un semiconductor tal como se reporta en las referencias [68, 70], pero ahora el gap de energía entre la banda de valencia y la de conducción depende del campo externo aplicado.

- **Intervalo  $H > \Delta$ :** En la curva azul de la figura **2-5** se muestra que no hay gap en la tasa. Analíticamente se obtuvo una expresión aproximada

$$\frac{\gamma(h, 0, H)}{N^2} \approx \begin{cases} 4(H - \Delta)h - \frac{2}{3}(H - \Delta)^{-1}h^3 + \mathcal{O}^5 & \text{si } h < (H - \Delta)/2, \\ \frac{\pi}{2}(H - \Delta)^2 - (H - \Delta)(\pi - 2)h + \frac{1}{2}(4 + \pi)h^2 + \mathcal{O}^3 & \text{si } h > (H - \Delta)/2. \end{cases}$$

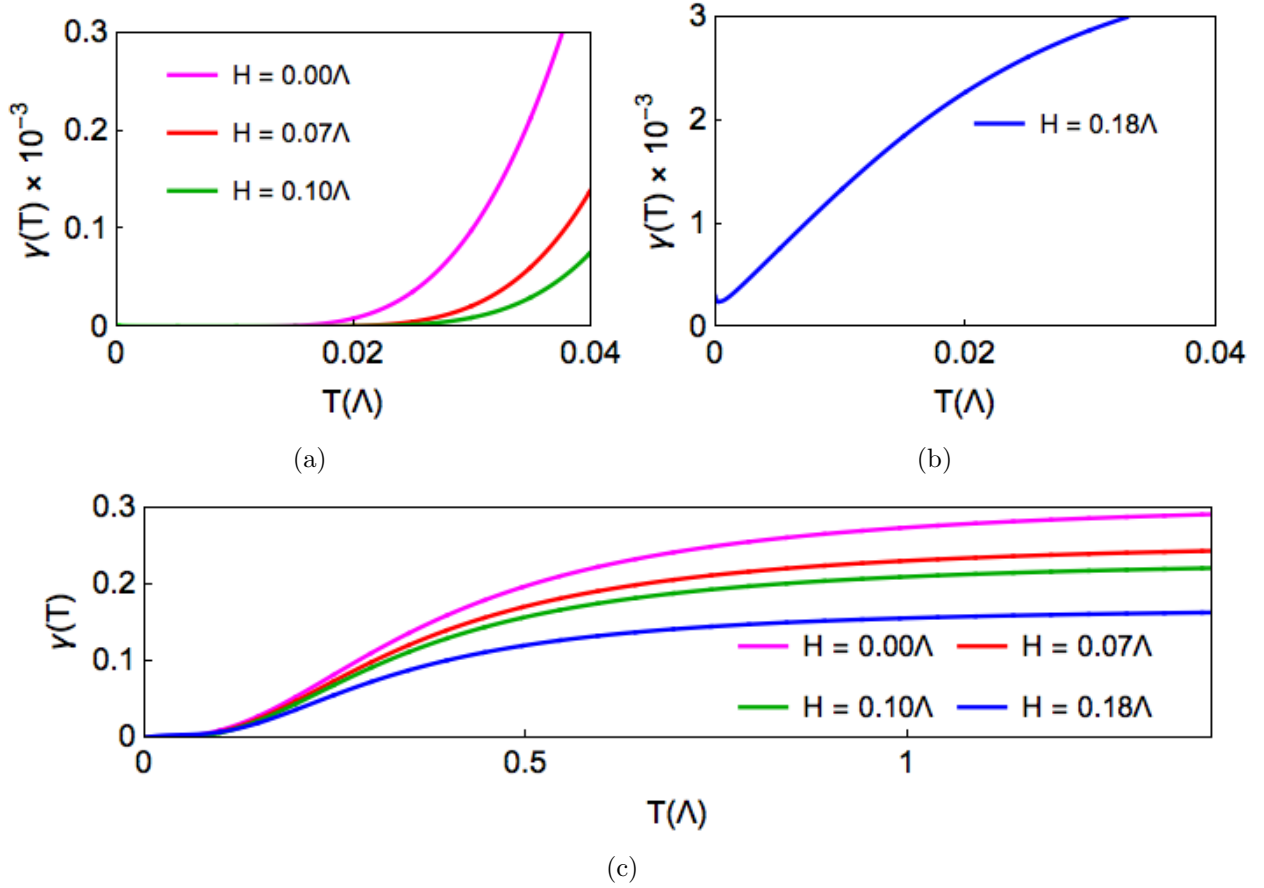
Aquí, el sistema exhibe una dependencia proporcional a  $h^3$  mientras  $h < \frac{H-\Delta}{2}$ . Con este comportamiento, se puede decir que el campo externo favorece las transiciones de forma tal que la pendiente de la curva es muy pronunciada. Luego, para  $h > \frac{H-\Delta}{2}$  se produce un cambio de concavidad y la curva se comporta de forma parabólica, donde  $h^2$  es el término dominante.

La **2-5(b)** muestra el comportamiento completo de la tasa de transición para  $H = 0$  y  $H = \Delta$ . Se observa que para valores pequeños de  $h$  la tasa aumenta con el campo. La figura **2-5(c)** muestra la tasa para tres temperaturas distintas. Esto indica que a mayor temperatura, la tasa en  $h = 0$  ya no es cero. Este resultado se debe a la activación térmica de los sistemas. Esto concuerda con lo descrito en las referencias [72, 65], quienes demostraron que el campo magnético actúa de una forma similar al potencial químico, haciendo que el baño actúe como si tuviera naturaleza distinta.

### Temperatura finita

La figura **2-6** muestra el comportamiento de las tasas cuando se incrementa la temperatura  $T_\nu$  y la frecuencia de qubit se mantiene constante, es decir, la diferencia de energía entre los dos niveles del qubit permanece igual. Para temperatura finita, se encontró que el comportamiento de las tasas también presenta los intervalos encontrados a temperatura cero. Recordando que la corriente depende de las tasas, estos intervalos son de gran importancia para determinar las características de la corriente. La figura **2-6(a)** muestra la tasa cuando se incrementa la temperatura del baño para el primer intervalo  $H < \Delta$  y **2-6(b)** para el segundo con  $H > \Delta$ .

- **Intervalo  $H \leq \Delta$ :** Se observa que la magnitud de las tasas decrece cuando se incrementa el valor del campo. La curva magenta con  $H = 0$  presenta un gap que depende de la DOS y el comportamiento de la tasa es proporcional a  $T^2$ . Para la curva roja el gap en la tasa es mayor comparado con la tasa en  $H = 0$ . Cuando  $H = \Delta$  se observa no existe gap, pero la magnitud de la tasa es la mas baja de todas, lo cual implica que el campo aplicado retrasa la activación térmica del sistema.
- **Intervalo  $H > \Delta$ :** en la curva azul se observa que la tasa tiene un valor elevado, incluso en  $T = 0$ , esto concuerda con la figura **2-5(b)**, donde se concluyó que el campo disminuye el gap hasta desaparecer cuando  $H \geq \Delta$ . Al no existir un gap de energía que



**Figura 2-6.:** Tasa de transición a medida que incrementa la temperatura (en unidades de  $\Lambda$ ) del reservorio aislante. Cada curva representa la tasa a un campo  $H$  diferente. La figura (a) muestra la tasa de transición de probabilidad en el intervalo  $[0, 0.04\Lambda]$  para el intervalo  $H \leq \Delta$  mientras que la figura (b) muestra el comportamiento en este mismo intervalo para la tasa con  $H > \Delta$ . La figura (c) muestra el comportamiento a altas temperaturas de las tasas, donde se puede observar su comportamiento asintótico. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$

medie las transiciones entre las bandas de valencia y conducción, el flujo de energía puede incrementar rápidamente.

También, es importante anotar que en el límite cuando  $T \rightarrow \infty$  el valor de la tasa se satura en todos los puntos y en especial para  $h = 0$ ,  $\gamma(0, \infty, H) = \frac{\Lambda}{2} - H$ . La información sobre el gap se pierde debido a la activación térmica, como se muestra en la referencia [69], y se explica que en baños fermiónicos el sistema es sensible a la naturaleza del baño a baja temperatura. Así mismo, muestran que para altas temperaturas los espines no correlacionados ocasionan fluctuaciones térmicas que saturan la tasa como se puede ver en la figura 2-6(c). También, se observa que la acción del campo a grandes temperaturas disminuye el flujo de energía, pero el comportamiento asintótico se mantiene. Este gráfico demuestra que el comportamiento

interesante sucede a bajas temperaturas, donde es posible distinguir la estructura de los baños.

### 2.2.2. Baño Metálico

Igual que en el caso del aislante, entender el comportamiento de las tasas facilita comprender el comportamiento de la corriente y la rectificación, dada la relación que existe entre ellas. En este caso el potencial químico es de  $0.18\Lambda$ .

#### Temperatura cero

La figura 2-7 muestra el comportamiento de la tasa de transición cuando se incrementa el valor de  $h$  y la temperatura del reservorio es cero. De la figura se observa que para todos los valores  $H$  la tasa es cero cuando  $h = 0$ . En general, como ocurre en el baño aislante, también existen regímenes que dependen del valor del campo externo y en metales, también del potencial químico.

- **Intervalo  $0 < H < \mu - \Delta$ :** En este intervalo, la curva magenta representa el comportamiento metálico del baño sin tener campo aplicado. La solución analítica que se obtuvo al resolver la ecuación 2-18

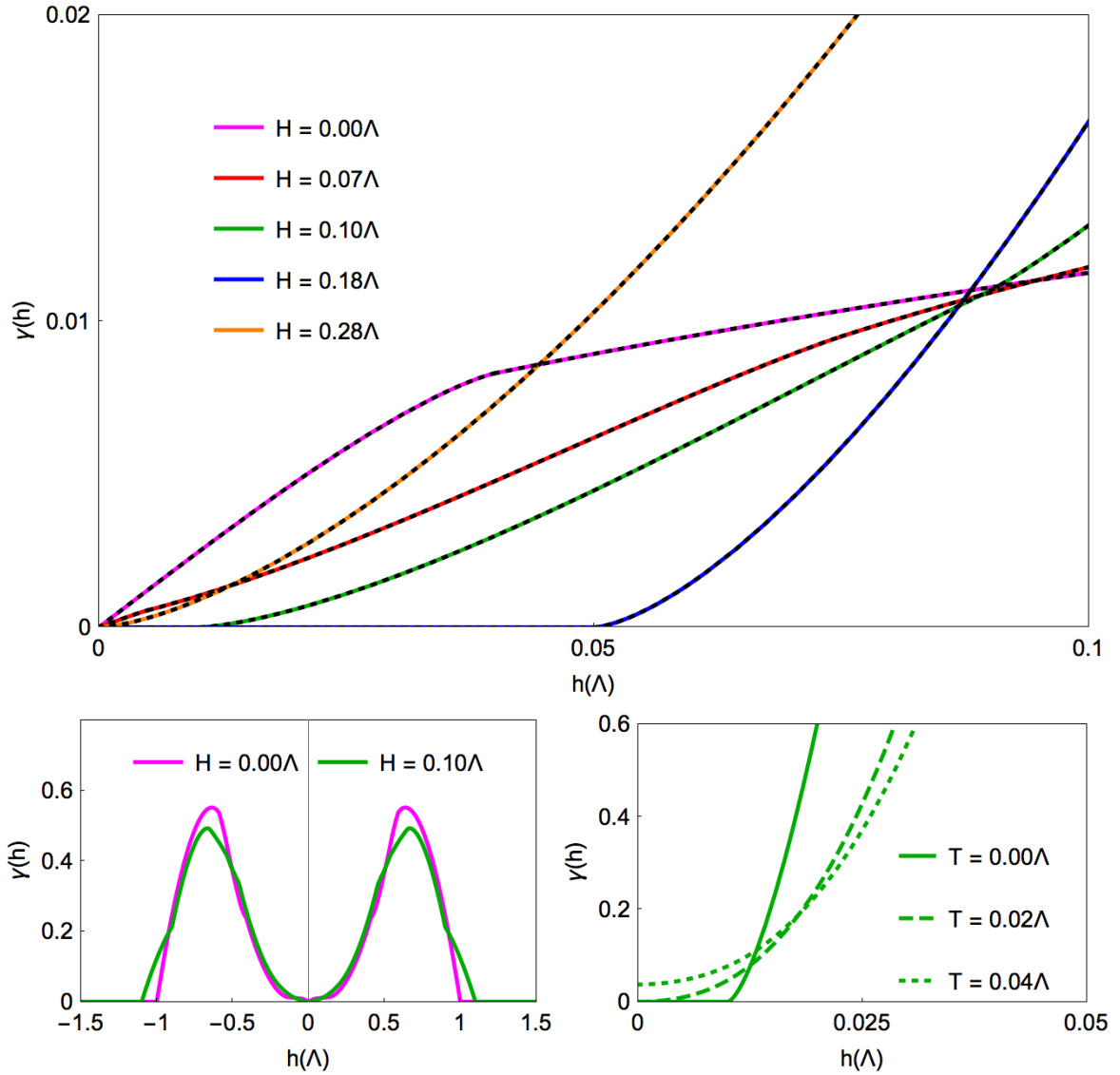
$$\gamma(h, 0, H) \approx 4((\mu - \Delta)^2 - H^2)^{\frac{1}{2}} + \frac{2}{3}h^3((\mu - \Delta)^2 + H^2)((\mu - \Delta)^2 - H^2)^{-\frac{3}{2}} + \mathcal{O}(h^5), \quad (2-22)$$

La ecuación anterior, muestra la dependencia directa de la tasa de transición con el campo externo  $H$  y el potencial químico  $\mu$ . La curva roja también pertenece a este intervalo y muestra cómo la tasa tiene ahora una magnitud menor, además la concavidad ha cambiado. Vale la pena resaltar que este mismo comportamiento analítico se observó en la tasa de transición para aislantes cuando  $H > \Delta$ , donde la tasa se encuentra gobernada solo por potencias impares. Esto implica que el comportamiento de la tasa en este intervalo (excepto en  $H = 0\Lambda$ ) se asemeja a un baño metálico, pero no corresponde a esta naturaleza.

- **Intervalo  $\mu - \Delta < H < \mu$ :** representada por la curva verde de la 2-7(a) tiene un comportamiento analítico:

$$\gamma(h, 0, H) \approx \begin{cases} 0 & \text{si } h \leq (\Delta - \mu + H)/2 \\ \frac{2}{3}((2h - H + \mu - \Delta)^3(H + \mu - \Delta))^{\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(h^5) & \text{si } h > (\Delta - \mu + H)/2, \end{cases} \quad (2-23)$$





**Figura 2-7.:** Tasas de transición de probabilidad para un baño metálico cuando se aplica un campo Zeeman, cada curva representa la tasa a un campo  $H$  diferente. La figura (a) muestra la tasa de transición a medida que aumenta la frecuencia característica  $h$  (en unidades de  $\Lambda$ ) del qubit a  $T = 0\Lambda$ . La figura (b) muestra el comportamiento completo de la tasa de transición de probabilidad en función de  $h$  para dos campos  $H$  distintos. La figura (c) muestra la tasa de transición de probabilidad para tres diferentes temperaturas, se observa que al aumentar la temperatura  $\gamma \neq 0$  cuando  $h = 0$ , gracias a la activación térmica. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $T = 0\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$

La magnitud de la tasa es menor en comparación con la curva roja, que representa el intervalo anterior; si bien esta forma analítica no es similar a ninguna de las vistas anteriormente, el gap que se genera sugiere que este comportamiento es de tipo aislante.

- **Intervalo  $\mu \leq \mathbf{H} \leq \mu + \Delta$ :** la curva azul representa la tasa cuando  $H = \mu$ . El gap que se genera por la acción del campo es máximo, o sea  $\Delta' = \Delta$  y la magnitud disminuye. Nuevamente, este gap indica un cambio en el comportamiento gracias al campo aplicado, sugiriendo que suprime totalmente la acción del potencial químico y el comportamiento del metal sería netamente “aislante”. Luego se observa que al aumentar el campo externo mas allá de este valor, disminuye como  $\Delta' = (\Delta + \mu - H)/2$  hasta desaparecer cuando  $H = \Delta + \mu$ , representado por la curva naranja con igual valor  $H = \mu + \Delta$  y su magnitud aumenta. De esto, se puede afirmar que el baño pasa a ser metálico de nuevo, con un potencial químico efectivo  $\mu' = H - \mu$ . Analíticamente, la tasa descrita se expresa como

$$\gamma(h, 0, H) \approx \begin{cases} 0 & \text{si } h \leq (\Delta + \mu - H)/2 \\ \frac{2}{3}((2h + H - \mu - \Delta)^3(H + \mu - \Delta))^{\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(h^5) & \text{si } h > (\Delta + \mu - H)/2, \end{cases} \quad (2-24)$$

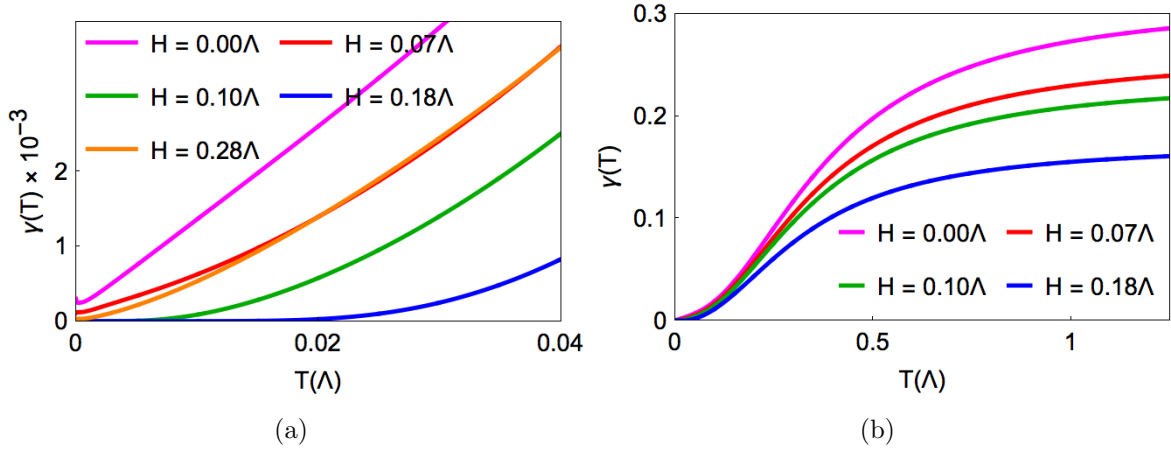
tanto para  $H = \mu$ , como para  $H = \mu + \Delta$ . Es notorio que nuevamente se presenta solo el termino relacionado con  $h^2$ , muy similar a la curva del intervalo  $\mu - \Delta < H < \mu$ , confirmando que esta tasa representa un comportamiento semejante a un aislante.

En cuanto a la figura 2-7(b), presenta el comportamiento completo de la tasa en todo el dominio de  $h$ , mostrando que el campo aplicado transforma la tasa de transición, aumentando el intervalo de  $h$  en el cual existe una probabilidad de tener transiciones. La figura 2-7(c) muestra la tasa de transición de probabilidad para tres diferentes temperaturas, dónde nuevamente se muestra la activación térmica con el aumento de la tasa en  $h = 0$ .

### Temperatura finita

A continuación se presenta el análisis de las tasas de transición cuando se incrementa la temperatura del baño. La figura 2-8(a) muestra el comportamiento de las tasas de transición de probabilidad para un baño metálico, cuando se incrementa su temperatura. Este gráfico exhibe los mismo intervalos observados para temperatura cero en 2-7(a).

- **Intervalo  $0 < \mathbf{H} < \mu - \Delta$**  la curva magenta corresponde a la tasa con  $H = 0A$  y su gráfico muestra el comportamiento típico de un baño metálico, luego, la curva roja en el mismo intervalo, muestra como la acción del campo disminuye la magnitud de la tasa. Podría predecirse de nuevo, que el campo aplicado generará un gap en la temperatura retardando la activación térmica, como se mostró para el baño aislante.
- **Intervalo  $\mu - \Delta \leq \mathbf{H} < \mu$ ,** la curva verde con  $H = \Delta$  muestra cómo la magnitud de la tasa ha disminuido considerablemente respecto a  $H = 0.07$ , esto se debe al gap que



**Figura 2-8.:** Tasa de transición a medida que incrementa la temperatura (en unidades de  $\Lambda$ ) del reservorio metálico. Cada curva representa la tasa a un campo  $H$  diferente. La figura (a) muestra la tasa de transición de probabilidad en el intervalo  $[0, 0.04\Lambda]$  para todos los campos aplicados, mientras que la figura (b) muestra el comportamiento a altas temperaturas de las tasas, donde se puede observar su comportamiento asintótico. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$

aparece en este intervalo, donde se hace evidente la interacción que existe ahora entre  $H$ ,  $\mu$  y  $T$  retrasando la activación térmica en este intervalo.

- **Intervalo**  $\mu \leq H \leq \mu + \Delta$ , la curva azul con  $H = \mu$  corresponde al campo externo donde se tiene la mayor atenuación en la tasa y su forma es muy similar a la de un aislante. La curva naranja con  $H = \mu + \Delta$ , la magnitud de la tasa es mayor y se debe a que el gap para este  $H$  ha desaparecido.

La gráfica 2-8(b) muestra el comportamiento para altas temperaturas, sucede lo mismo que en el aislante. Las tasas aumentan su magnitud hasta saturarse, de esta forma puede verse cómo la naturaleza del baño se pierde y ambos, aislante y metal se comportan igual. Analizando las curvas en general, en los distintos regímenes se presenta un comportamiento que se asemeja a los baños aislantes, pero esto depende netamente de la interacción entre  $H$  y  $\mu$ . Lo dicho anteriormente refuerza el resultado visto en la sección anterior acerca de los baños aislantes sobre la interpretación que al aplicar un campo magnético este se comporta efectivamente como un potencial químico, que en este caso, retarda el efecto potencial químico real y compite con él. De hecho, cuando el campo externo supera el valor de  $\mu$  es evidente que el sistema intenta recuperar su forma de metal. También, es importante anotar que aunque en los distintos regímenes las tasas de los baños metálicos se asemejen a las de baños aislantes e inclusive tener el mismo gap, ambos baños son totalmente distintos entre si. Este resultado puede ser aprovechado para obtener efectos diferentes usando el campo externo

como parámetro de control, aumentando o disminuyendo el valor de la tasa a conveniencia.

### Consideraciones generales para el análisis de la corriente, la rectificación y NDTC

A continuación, se estudian y analizan cuatro configuraciones para los reservorios, considerando el sistema dibujado en la figura **2-2**, para determinar si cambiando la naturaleza del baño y/o aplicando un campo magnético se postulan como dispositivos termotrónicos. La primera es una configuración donde los baños son aislantes, y se aplica campo externo en el baño derecho. Luego se explora una configuración donde los baños son metálicos, con campo externo aplicado en el baño derecho y finalmente, dos configuraciones donde se combina un baño aislante y otro metálico, con campo aplicado en al menos uno de los baños. En los cuatro casos se analiza el comportamiento de la corriente, rectificación y NDTC.

Se consideró un sistema central compuesto por un qubit o espín  $1/2$  con frecuencia característica  $h$  acoplado a dos reservorios térmicos derecho ( $R$  por su sigla en inglés) e izquierdo ( $L$  por su sigla en inglés) que no interactúan entre si con temperaturas respectivas  $T_L$  y  $T_R$ . Siguiendo la idea expuesta durante todo el documento, se genera una asimetría en la configuración aplicando un campo Zeeman en uno de los dos baños.

En todos los casos, la corriente será calculada con la ecuación 2-19 en términos de la temperatura promedio entre los baños

$$T_a = \frac{1}{2}(T_L + T_R) \quad (2-25)$$

y la diferencia entre dichas temperaturas

$$\Delta T = T_L - T_R. \quad (2-26)$$

Al encontrarse ambos baños a distinta temperatura es de esperar que se genere un flujo de calor desde el baño caliente al baño frío, como lo dicta la termodinámica. Se define el sentido positivo de la corriente  $J^+$  de  $L$  a  $R$  cuando  $T_R < T_a < T_L$  y el sentido negativo  $J^-$  de  $R$  a  $L$  cuando  $T_L < T_a < T_R$ . Ambas corrientes, que son además las que se comparan en la expresión 2-20 se grafican en las figuras **2-9(a)**, **2-13(a)**, **2-18(a)**, **2-22(a)** para las diferentes configuraciones. Lo que cambia en las configuraciones en la expresión 2-19 de la corriente son las tasas (las ocupaciones no dependen de los campos) y por tal motivo es útil graficar las tasas de  $J^+$  y  $J^-$  para entender el comportamiento de la corriente. Un ejemplo de estas figuras es **2-9(b)** y **2-9(c)** (**2-13(b)** y **2-13(c)**, **2-18(b)** y **2-18(c)**, **2-22(b)** y **2-22(c)**). La **2-9(b)** servirá así para entender el comportamiento de  $J^-$  donde la temperatura mayor es la de  $R$  y la menor es la de  $L$  (mirar las letras en las figuras). De igual forma **2-9(c)** servirá para entender el comportamiento de  $J^+$  donde la temperatura mayor es la de  $L$  y la menor es la de  $R$ .

El análisis hecho en la corriente se divide en tres partes, primero se listan aspectos generales, luego se analiza la corriente para  $\Delta T < 0$  ( $J^-$ ) y finalmente para  $\Delta T > 0$  ( $J^+$ ). Las figuras

**2-11**, **2-15**, **2-19** y **2-23** muestran la corriente y la rectificación en función de la temperatura. Y finalmente las figuras 3D **2-12**, **2-16**, **2-20** y **2-24** muestran cómo varía la rectificación y la NDTC para cada configuración.

La NDTC se puede ver a simple vista desde las figuras de corriente. La termodinámica predice que al aumentar  $\Delta T$  la corriente debe aumentar, NDTC es lo contrario. Así pues, para dar un ejemplo, en la figura **2-9(a)** hay NDTC cuando  $\Delta T < 0.01A$  (ver también curva negra en 3D) y cuando  $\Delta T > 0.006A$  (ver curva roja 3D). En cambio en una configuración como la de la fig **2-13(a)** no hay NDTC porque al aumentar  $\Delta T$  la corriente siempre aumenta.

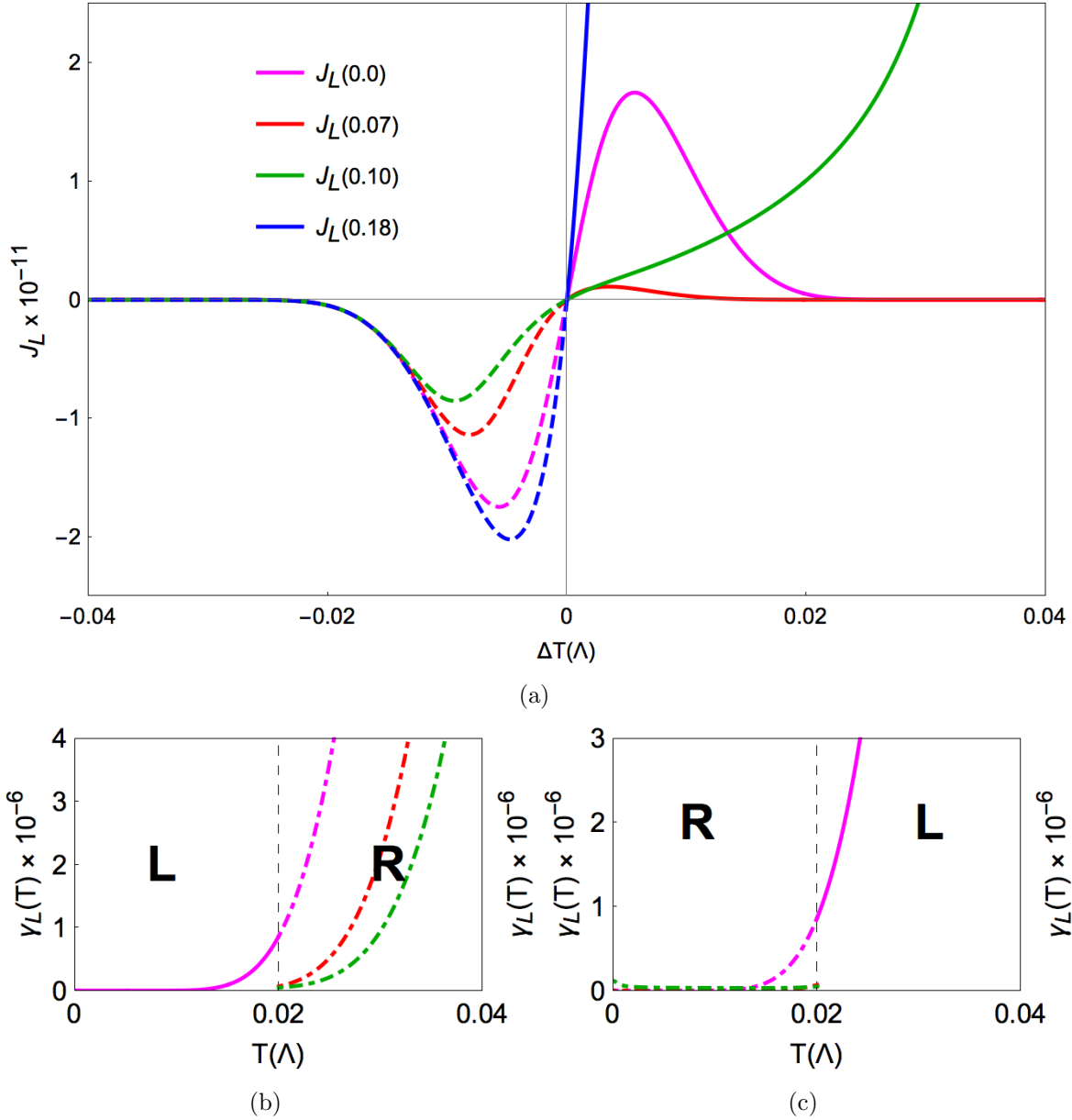
## 2.3. Configuración Aislante-Aislante

Como se dijo, el análisis de la corriente se hizo a partir de tres gráficos. El gráfico **2-9(a)** presenta la corriente  $J^+$  con líneas sólidas y  $J^-$  con líneas punteadas. Los diferentes colores representan los valores de campo usados.

### 2.3.1. Corriente

#### Aspectos generales

- En general, cuando la tasa de alguno de los dos baños es cero, la corriente es cero, porque  $J \propto 1/(1/\gamma_L + 1/\gamma_R)$ . Esto sucede para la corriente en  $\Delta T < 0$  y para valores de  $H < \Delta$  en  $\Delta T > 0$ .
- Todas las corrientes son cero en  $T = 0$ , esto sucede ya que  $\Delta T = 0$ , por lo tanto  $T_L = T_R$  y  $n_L(h, 0) = n_R(h, 0)$ , lo que implica que los niveles están igualmente ocupados y al no depender del campo externo, la corriente también se vuelve cero para todo  $H$  en este caso.
- Cuando  $H_R = H_L = 0$ , representado por la curva magenta sólida y punteada en la figura **2-9(a)**, las tasas y las ocupaciones son iguales en todo el intervalo de  $\Delta$ , por tanto  $J^+ = J^-$ .
- El signo de la corriente solo depende de las ocupaciones, ya que las tasas son definidas positivas desde su cálculo en la ecuación maestra de Pauli. Cuando  $\Delta T < 0$ ,  $n_L(h, 0) < n_R(h, 0)$  y la corriente  $J^-$  será negativa, indicando que el flujo de energía va desde el estado base  $|g\rangle$ , al excitado  $|e\rangle$  en el qubit. De igual forma, cuando  $\Delta T > 0$  la corriente  $J^+$  es positiva con  $n_L(h, 0) > n_R(h, 0)$ , con el flujo de energía desde  $|e\rangle$  hasta  $|g\rangle$ .



**Figura 2-9.:** Cambio de la corriente  $J_L^\pm$  al medida que aumenta la diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los reservorios y sus respectivas tasas de transición para una configuración aislante-aislante, cada curva representa un campo  $H$  distinto. La figura (a) muestra la corriente en ambas direcciones  $J^+$  y  $J^-$ , en este caso,  $\Delta T > 0$  corresponde a  $J^+$  y  $\Delta T < 0$  a  $J^-$ . La figura (b) muestra las tasas de transición usadas para el cálculo de la corriente  $J^-$  y la figura (c) las tasas usadas para la corriente  $J^+$ . Para estos gráficos, cada corriente se analiza comparando la tasa para el baño  $L$  con la tasa para cada campo en el baño  $R$ . Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$

**$\Delta T < 0$** 

En el intervalo  $\Delta T < 0$ , el comportamiento de la corriente  $J^-$  se explica si se observa la tasa de transición para el baño izquierdo con  $H_L = 0$  en el intervalo de temperatura  $[0, 0.02]$  con línea sólida, contrastada con la tasa para el baño derecho con  $H_R$  en el intervalo  $[0.02, 0.04]$  con línea punteada, como muestra la figura **2-9(b)**. Se observa que:

- Los mínimos en todas las curvas en la figura **2-9(a)** se producen cuando el denominador de la ecuación 2-19 es máximo, gracias a que  $J \propto 1/(1/\gamma_L + 1/\gamma_R)$ .
- Para valores de campo externo  $H \leq \Delta$  **2-9(a)** la corriente tiene una magnitud menor y si se observa en la curva roja punteada en **2-9(b)**, las tasas disminuyen su magnitud en este intervalo, indicando que el campo realiza una supresión en el flujo de energía en este intervalo, siendo menor en la curva verde con  $H = \Delta$ .
- Cuando  $H > \Delta$  en la curva azul la magnitud de la corriente aumenta, esto también corresponde a lo visto en las tasas de transición, donde la magnitud es mayor incluso que  $H = \Delta$ . Esto se le atribuye a la forma en la que el campo actúa sobre el sistema. Una vez el campo aplicado sobrepasa el gap que existe entre la banda de valencia y conducción del aislante, se comporta como un potencial químico, privilegiando así la conducción.

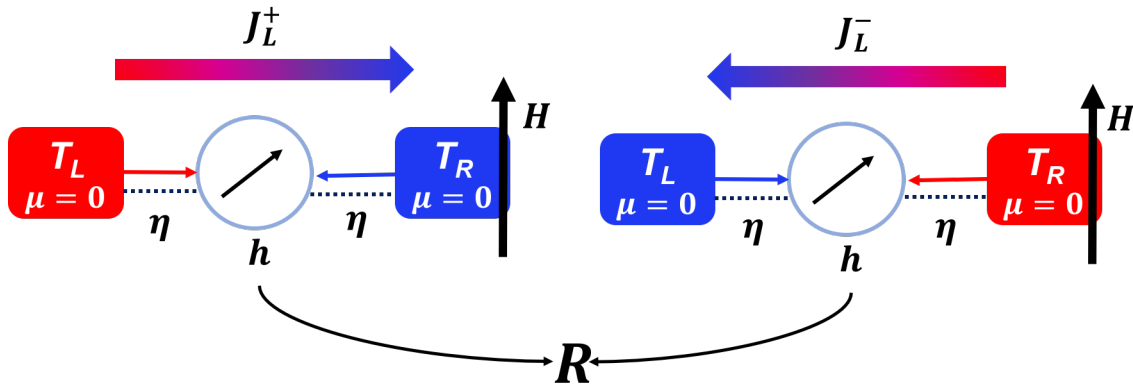
 **$\Delta T > 0$** 

Ahora, la corriente  $J^+$  en el intervalo  $\Delta T > 0$ , se explica nuevamente comparando la tasa del baño izquierdo en el intervalo  $[0.02, 0.04]$  cuando  $H_L = 0$  representado con línea sólida, versus la tasa del reservorio derecho con  $H_R$  en el intervalo  $[0.02, 0]$  con líneas punteadas, como muestra la figura **2-9(c)**.

- Los máximos en las curvas magenta y roja en la figura **2-9(a)** se producen cuando el denominador de la ecuación 2-19 es mínimo, gracias a que  $J \propto 1/(1/\gamma_L + 1/\gamma_R)$ .
- Cuando  $H < \Delta$  representado por la curva roja, la magnitud de la corriente es menor que en  $H = 0$ . Se observa una gran supresión de la corriente en este intervalo, pero en  $H = \Delta$  en la curva verde la corriente se dispara debido a que la tasa para el baño  $R$  en  $\Delta T = 0.04$  ( $T_R = 0, T_L = 0.04$ ) tiene un valor distinto de cero y  $n_R(-h, 0) \rightarrow (1/2)$  mientras la tasa para el baño  $L$  tiene una magnitud mucho mayor, pero  $n_L(-h, 0) \approx 0$ , inclinando el flujo de calor hacia el baño  $R$ .
- Para  $H > \Delta$  representada por la curva azul, el comportamiento es igual que en el intervalo anterior, pero esta vez la tasa para  $R$  tiene una magnitud mucho mayor en  $T = 0$ , disparando el valor de la corriente.

En la gráfica 2-9 es evidente que  $\Delta T > 0$  es muy diferente a  $\Delta T < 0$ , inclusive con puntos donde una es cero y otra muy grande, indicando que la aplicación de campo magnético en un solo baño si produce una asimetría entre las corrientes y recordando el modelo de baños estructurados, podría decirse que el campo externo actúa como el potencial químico, privilegiando el transporte de energía entre bandas, ejerciendo control sobre el flujo de calor. Esencialmente, la asimetría introducida afecta la activación térmica en el sistema, retrasándola cuando el campo externo es menor que el gap de energía y privilegiándola cuando el campo es mayor.

### 2.3.2. Rectificación

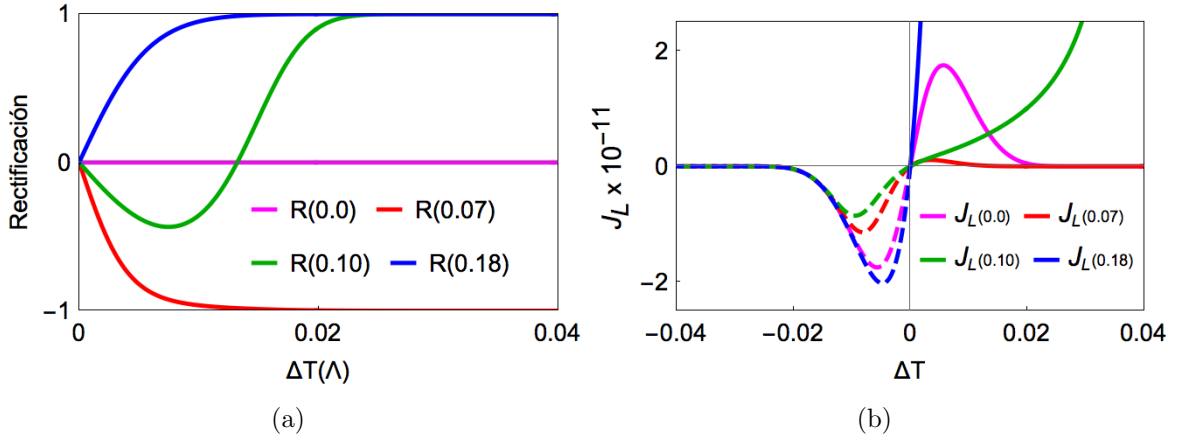


**Figura 2-10.:** Diagrama esquemático del cálculo de la rectificación en la configuración qubit-dos reservorios cuando los baños son aislantes y es aplicado un campo Zeeman en el baño derecho.

Dada las propiedades que presenta la corriente en esta configuración, es decir  $J^- \neq J^+$ , se estudia la rectificación usando la expresión 2-20 y siguiendo la idea expuesta a lo largo del documento, es deseable el efecto de la asimetría en la configuración cuando el campo Zeeman está aplicado en el baño derecho, como lo muestra el diagrama de la figura 2-10. La figura 2-11(a) muestra el comportamiento para la rectificación en función de  $\Delta T$  versus el campo externo aplicado en el baño  $R$ . En este gráfico también se evidencian los regímenes de las tasas de transición como se corrobora en la gráfica 2-11(b), donde se grafica de nuevo la corriente para facilitar la comprensión.

- Para  $H \leq \Delta$ , en la figura 2-11(a), la rectificación es cero cuando no hay campo aplicado, si se observa la corriente con curva magenta en la figura 2-11(b) se muestra que  $J^- = J^+$ . En general, para este intervalo la rectificación es negativa, esto se debe a que  $J^- > J^+$  como se ve en la curva roja y también se observa que la rectificación llega a su máximo valor, lo cual sucede porque  $J^+$  se hace cero primero que  $J^-$ .





**Figura 2-11.:** Rectificación y corriente en función de la diferencia de temperaturas entre los baños  $\Delta T$  para diferentes valores de  $H$  en una configuración aislante-aislante. La figura (a) muestra la rectificación y la figura (b) muestra la corriente  $J^+$  y  $J^-$  en función de la diferencia de temperaturas. Condiciones  $\hbar = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $\Lambda = 1eV$

- En  $H = \Delta$ , en un inicio en la figura 2-11(b)  $J^- > J^+$  y luego  $J^+$  crece hasta igualar a  $J^-$  generando una región de temperatura donde no hay transporte de energía neto y  $R = 0$  en 2-11(a) en las cercanías de  $\Delta T = 0.02$ , pero  $J^+$  sigue creciendo, hasta que  $J^+ > J^-$  y la rectificación se hace positiva y máxima cuando  $J^-$  se suprime para valores de  $\Delta T > 0.02$ .
- Para  $H > \Delta$ , se muestra que la rectificación se hace máxima rápidamente a pequeños pasos en  $\Delta T$ . Esto sucede gracias a que la corriente en el sentido  $J^-$  se suprime mientras que  $J^+$  incrementa notablemente, como se puede ver en la figura 2-11(b).

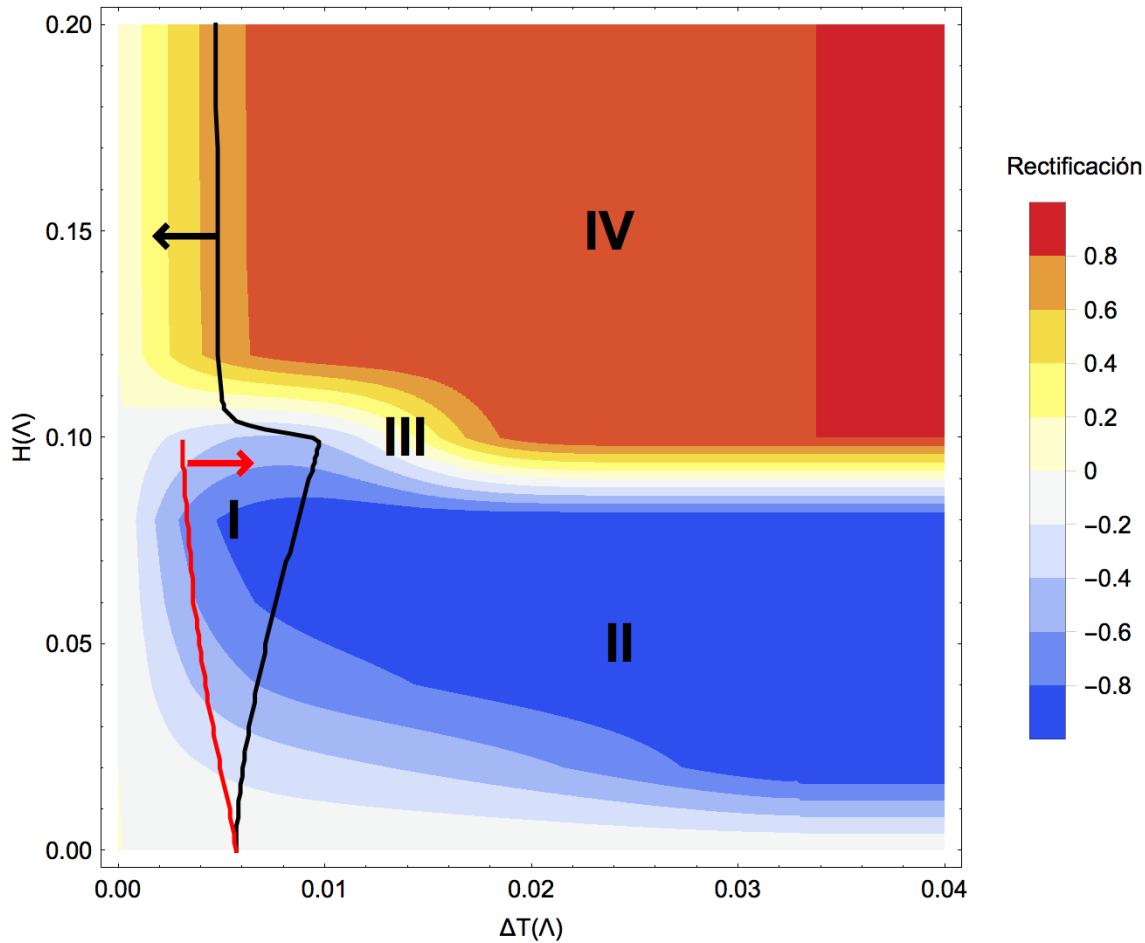
En términos de transporte de energía, al aumentar diferencia de temperatura entre ambos baños, es más efectiva la transferencia desde el nivel superior hacía el inferior en el qubit cuando el campo supera al gap. Este resultado implica que al introducir esta asimetría en el sistema, la dirección de la corriente podría ser controlada a conveniencia aplicando campos magnéticos, mostrándose como un buen candidato a diodo térmico. Además, tener la posibilidad de cambiar el signo de la rectificación sin cambiar la naturaleza de los baños, ofrece una alternativa mas sencilla desde la ingeniería de reservorios para experimentos tales como diodo o transistor térmico, enfriadores cuánticos, máquinas térmicas cuánticas entre otros.

## NDTC

Para que este sistema sea visto como una aplicación potencial en el área de la termotrónica, se debe considerar una condición necesaria para la construcción de un diodo térmico y es la

supresión de la corriente en una de las dos posibles direcciones: esta propiedad es llamada Conductividad diferencial térmica negativa, NDTC por su sigla en inglés. La NDTC se presenta como un comportamiento no predecible en la corriente, y en este caso, si la diferencia de temperaturas entre los baños aumenta, el flujo de energía disminuye, lo cual implica que su derivada (que se puede interpretar como la pendiente en esa región) será negativa; además, también es necesario que ambas corrientes  $J^-$  y  $J^+$  sean diferentes en magnitud.

La figura 2-12 muestra los intervalos donde se presenta NDTC en el sistema y solo se



**Figura 2-12.:** Mapa de calor para la rectificación en función de  $\Delta T$  y  $H$ . La curva negra y la roja representan los intervalos con NDTC y son graficadas en el valor absoluto de  $|\Delta T|$  para visualizar su acción en la rectificación.

muestra el valor positivo dado que la rectificación es una comparación de la corriente en ambos sentidos. La línea negra representa el extremo del intervalo donde existe NDTC en  $\Delta T < 0$  y va de derecha a izquierda, la línea roja representa el extremo del intervalo que va de izquierda a derecha con NDTC en  $\Delta T > 0$ . Se observa que para  $H = 0$ , existe NDTC en ambas direcciones pero las corrientes son iguales, por lo tanto no hay rectificación. Nuevamente, el comportamiento se divide por regiones:

- Cuando  $H < \Delta$ , la región donde hay intersección de la NDTC para ambas direcciones se amplía pero sigue presentando baja rectificación en su mayoría, mostrando que tener NDTC no implica tener rectificación. Dentro de este intervalo existen otras dos zonas o regiones: La región **I** está a la izquierda en la parte inferior, allí solo existe NDTC para  $\Delta T < 0$  y es una región con rectificación baja. La región **II** hacia la derecha inferior del mapa: allí solo existe NDTC para  $\Delta T > 0$  y presenta alta rectificación, por lo cual en esta región se obtienen las condiciones apropiadas para la construcción de un diodo.
- La región **III** se presenta alrededor de  $H = \Delta$ . Aquí no se tiene NDTC para  $\Delta T > 0$ , dado que la corriente siempre crece, eso significa que la curva roja no continúa, pero la curva negra muestra que si existe NDTC para  $\Delta T < 0$ , y se marca el límite entre rectificación positiva y negativa.
- Finalmente, en el intervalo **IV** para  $H > \Delta$  se presenta NDTC para  $\Delta T < 0$  se hace más pequeño y combinado con la no-supresión en  $\Delta T > 0$ , la rectificación se vuelve rápidamente 1, pero en este caso la región de alta rectificación no coincide con la región NDTC, por lo tanto no cumple las condiciones para tener un diodo térmico, esto demuestra que tener una alta rectificación no implica tener NDTC.

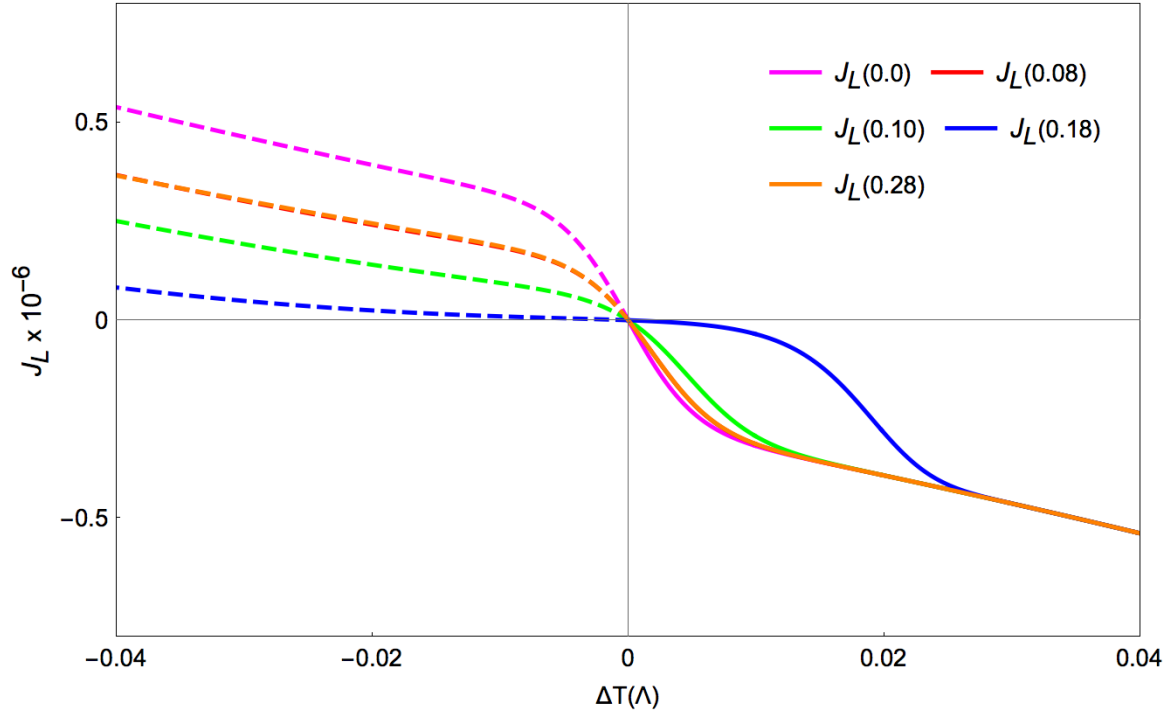
## 2.4. Configuración Metal-Metal

### 2.4.1. Corriente

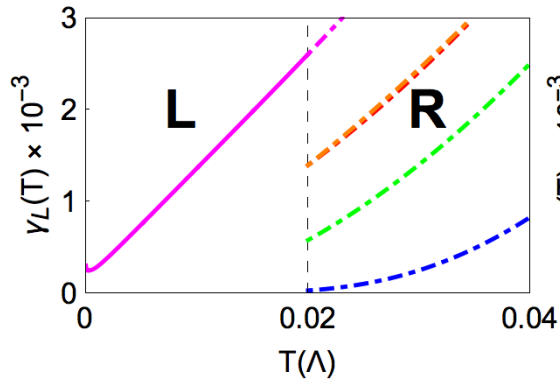
En esta sección, en la configuración mostrada en la figura **2-2** los baños serán metálicos con un potencial químico para ambos baños de  $\mu = 0.18\lambda$ . La figura **2-13(a)** muestra el cambio de la corriente cuando se aumenta la diferencia de temperaturas entre los reservorios y las tasas de transición correspondiente a cada corriente. Aquí, las curvas a trazos corresponden a  $J^-$  y las sólidas a  $J^+$ . Nuevamente, el comportamiento de la corriente exhibe las regiones que se observaron en las tasas de la figura **2-8** y sus gráficos son puestos nuevamente en las figuras **2-13(b)** y **2-13(c)** para una mejor comprensión.

#### Aspectos generales

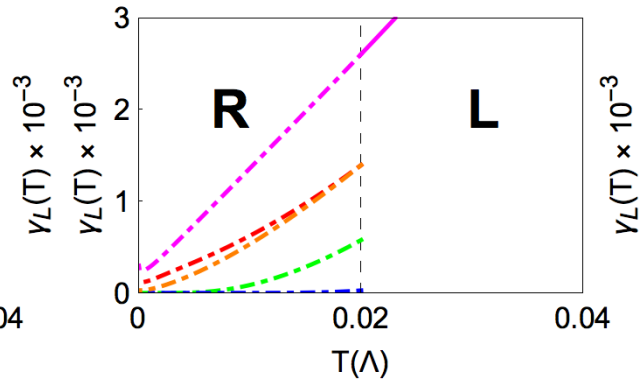
- Todas las corrientes en **2-13(a)** son cero en  $\Delta T = 0$  ya que  $T_L = T_R$  y  $n_L(h, 0.18) = n_R(h, 0.18)$ . Esto implica que los niveles están igualmente ocupados y al no depender del campo externo, la corriente también es cero para todo  $H$ .
- El signo de la corriente solo depende de las ocupaciones, ya que las tasas son definidas positivas desde su cálculo en la ecuación maestra de Pauli. Cuando  $\Delta T > 0$  en **2-13(a)**,  $n_L(h, 0.18) < n_R(h, 0.18)$  y la corriente  $J^+$  será negativa, indicando que el flujo



(a)



(b)



(c)

**Figura 2-13.:** Cambio de la corriente  $J_L^\pm$  al medida que aumenta la diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los reservorios y sus respectivas tasas de transición, cada curva representa un campo  $H$  distinto. La figura (a) muestra la corriente en ambas direcciones  $J^+$  y  $J^-$ , en este caso,  $\Delta T > 0$  corresponde a  $J^+$  y  $\Delta T < 0$  a  $J^-$ . La figura (b) muestra las tasas de transición usadas para el cálculo de la corriente  $J^-$  y la figura (c) las tasas usadas para la corriente  $J^+$ . Para estos gráficos, cada corriente se analiza comparando la tasa para el baño  $L$  con la tasa para cada campo en el baño  $R$ . Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$ .

de energía va desde el estado base  $|g\rangle$ , al excitado  $|e\rangle$  en el qubit. De igual forma, cuando  $\Delta T < 0$  la corriente  $J^-$  es positiva con  $n_L(h, 0.18) > n_R(h, 0.18)$ , con el flujo de energía desde  $|e\rangle$  hasta  $|g\rangle$ .

$\Delta T < 0$ 

La figura **2-13(b)** muestra el comportamiento de las tasas para la corriente  $J^+$  en  $\Delta T < 0$ . Las regiones observadas en las tasas mostradas allí, se hacen evidentes en la corriente.

- La corriente  $J^-$  se muestra en el recuadro izquierdo de la figura **2-13(a)**. Para el campo  $H = 0$  con curva magenta tiene una magnitud mayor que la corriente para los campos hasta  $H = \mu$ , debido a que la tasa para  $H = 0$  tienen una magnitud mayor, como se puede ver al comparar la curva magenta punteada en la figura **2-13(b)**.
- Se observa que en el intervalo  $H \leq \mu$  las tasas en el baño  $R$  (curvas roja, verde y azul) tienen una magnitud menor cuando incrementa el campo, por tal razón, la magnitud de corriente también disminuye. Esto implica que el flujo de energía entre los niveles del qubit disminuye cuando se incrementa el valor del campo.
- En  $H = \mu$  con curva azul, la corriente  $J^-$  alcanza su magnitud mínima, indicando que el campo aplicado retrasa la activación térmica.
- Luego, cuando  $H > \mu$ , la corriente de curva naranja en **2-13(a)** nuevamente incrementa su magnitud al incrementar el campo y se solapa con la curva roja, sucediendo lo mismo con las tasas correspondientes en **2-13(b)**.

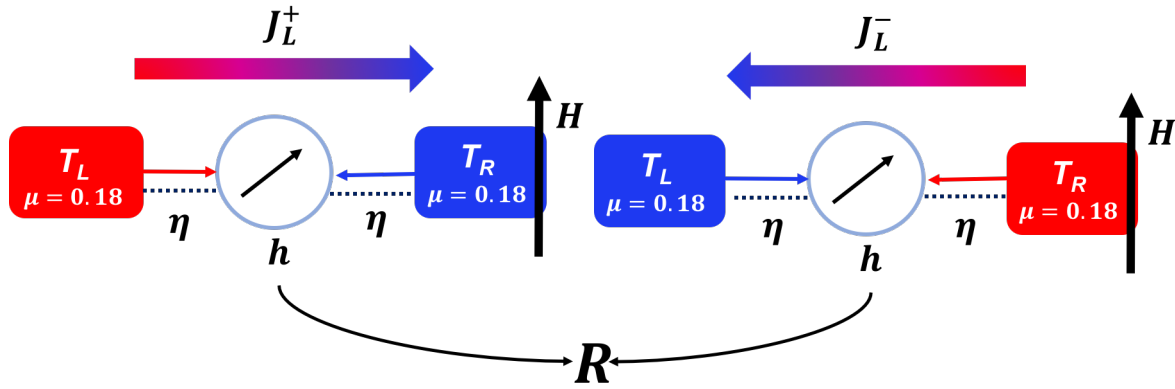
 $\Delta T > 0$ 

- En el recuadro derecho de la figura **2-13(a)** se muestra la corriente  $J^+$ . Para las curvas de corriente con  $H \leq \mu$  (roja y verde), la magnitud de la corriente disminuye, siendo mínima en  $H = \mu$  con curva azul. Este comportamiento se debe directamente a las tasas de transición dibujadas en la figura **2-13(c)**, donde la curva punteada magenta es la de mayor magnitud.
- En la curva azul cuando  $H = \mu$  se presenta un gap se debe a que la magnitud de la tasa para el baño  $R$  en este caso es muy pequeña, como se puede corroborar en la figura **2-13(c)**.
- Para  $H > \mu$  sucede lo mismo que en  $J^-$  ya que  $J^+$  crece como se ve en la curva naranja sólida en **2-13(a)** y se solapa con la curva roja. Como se puede ver, este comportamiento es el reflejo de las tasas en **2-13(c)**, donde la curva roja y naranja punteadas se solapan.

En ambos intervalos de  $\Delta T$  en la figura **2-13(a)** se observa que el comportamiento de la corriente obedece al comportamiento del baño que se encuentra sometido a campo externo, que en este caso es el baño  $R$ . Ahora, se analiza la rectificación usando de nuevo la ecuación 2-20.

### 2.4.2. Rectificación y NDTC

Dadas las propiedades que presenta la corriente en esta configuración, ahora se grafica la corriente usando la expresión siguiendo la idea expuesta en el párrafo anterior, se genera una asimetría en la configuración aplicando un campo Zeeman en el baño derecho, como lo muestra la figura 2-14. Usando de nuevo la ecuación 2-20, se grafica la rectificación en función

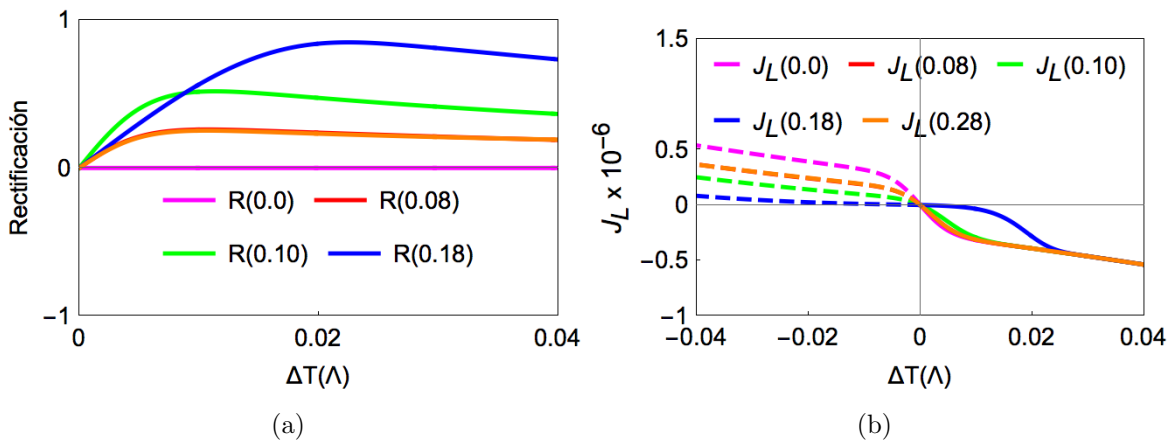


**Figura 2-14.:** Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración un qubit y dos reservorios metálicos con potencial químico  $\mu = 0.18\Delta$

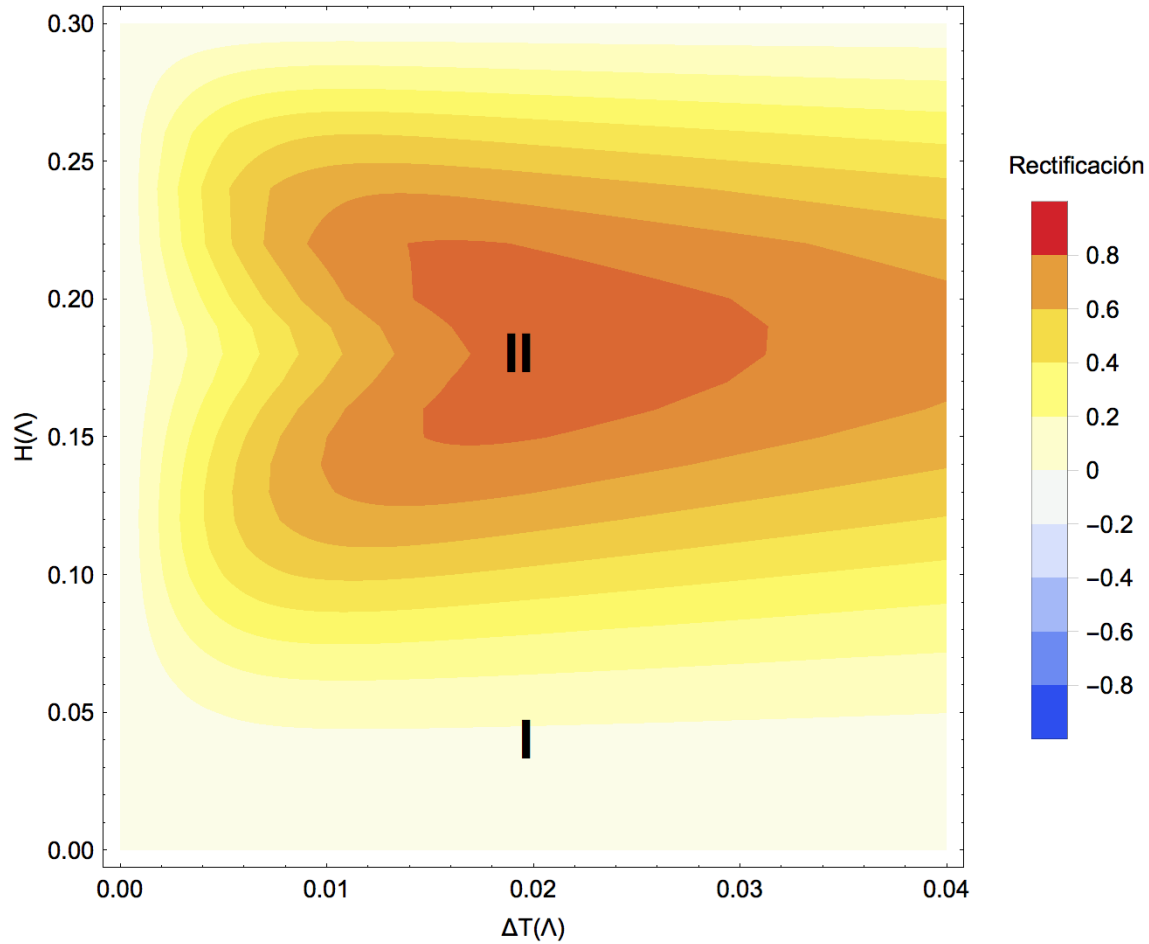
de la diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los baños, manteniendo la temperatura promedio  $T_a = 0.02\Delta$ . La figura 2-15(a), muestra el comportamiento de la rectificación cuando se aumenta la diferencia de temperatura para distinto valores de campo Zeeman. Aquí, nuevamente se acompaña el análisis con las curvas de corriente en la figura 2-15(b) vistas en la sección anterior para facilitar la comprensión. En general, la rectificación es positiva dado que  $|J^+| > |J^-|$ , como se observa en la figura 2-15(b). Cuando  $T_L = T_R$  y  $H = 0$ , la rectificación es cero gracias a que  $J^+ = J^-$ , por esta razón la curva magenta en el gráfico 2-15(a) es nula. La rectificación en  $H \leq \mu$  es cada vez mayor; lo cual se debe a que la corriente  $J^-$  cada vez tiene una magnitud menor en comparación con  $J^+$ , siendo mínima en  $H = \mu$  con  $R \approx 80\%$ . En este valor del campo se presenta un crecimiento lento de la corriente para  $J^+$  y volviendo a las tasas de transición, obedece a la supresión de flujo en este intervalo. En cuanto al transporte de energía, esto significa que el flujo en este punto es el máximo presentado, siempre desde el nivel superior al inferior. Cuando  $H > \mu$   $R$  con curva naranja en 2-15(a), ha disminuido su magnitud ya que en este caso el campo es mayor al potencial químico aumentando la magnitud de ambas corrientes  $J^+$  y  $J^-$ , haciéndolas similares. Esta observación reafirma la conclusión referida a la acción del campo: este se comporta como un potencial químico efectivo que compite con el potencial químico real y una vez superado, este aumenta el flujo de energía en todo el sistema.

Dado que existe una zona de alta rectificación, es necesario determinar si existe NDTC en la

configuración. Como se dijo en la configuración aislante-aislante, la NDTC es una condición necesaria en los dispositivos candidatos en la termotrónica y debe ser analizada en este caso también. La figura 2-16 muestra el mapa de calor para la rectificación cuando se incrementa la diferencia de temperaturas entre los reservorios. En esta configuración se presentan dos zonas, en la primera zona  $I$  de baja rectificación ambas corrientes tienen un crecimiento constante en todo el intervalo de temperatura, eso quiere decir que no existe NDTC para todos los valores de campo aplicado. En cuanto a  $J^+$  solo se observa un crecimiento lento cuando  $H = \mu$  en el intervalo  $[0, 0.02]$  como se corrobora en la figura 2-15(a) que implica una rectificación del 80 %, señalado como la región  $II$  en la figura 2-16. En esta región ambas corrientes aumentan, lo cual significa que no existe NDTC. Este resultado implica que esta configuración no tiene las condiciones necesarias para ser un buen candidato a diodo térmico, ya que el transporte de calor en la dirección  $J^+$  obedece solo a la diferencia de temperaturas y no a la configuración del sistema, como asimetrías inducidas a través del campo. De otro lado, en esta configuración puede ser aprovechada la simetría que existe y aplicar el campo en el reservorio izquierdo, así las corrientes se invierten y el sentido en el cual se realiza el flujo de calor será contrario y la rectificación será negativa. Esto quiere decir que el flujo de energía se daría desde el baño frío al caliente y así ‘enfriar’ el reservorio frío. Aprovechando las propiedades que presentan ambos baños en cuanto a la acción del campo sobre cada tipo de reservorio, se propone también una configuración mixta para diodo combinando un reservorio metálico y uno aislante.



**Figura 2-15.:** Rectificación y corriente en función de la diferencia de temperaturas entre los baños  $\Delta T$  para diferentes valores de  $H$  en una configuración metal-metal. La figura (a) muestra la rectificación y la figura (b) muestra la corriente  $J^+$  y  $J^-$  en función de la diferencia de temperaturas. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$



**Figura 2-16.:** Mapa de rectificación en función de  $\Delta T$  y  $H$ . En este caso no se observa NDTC en la corriente.

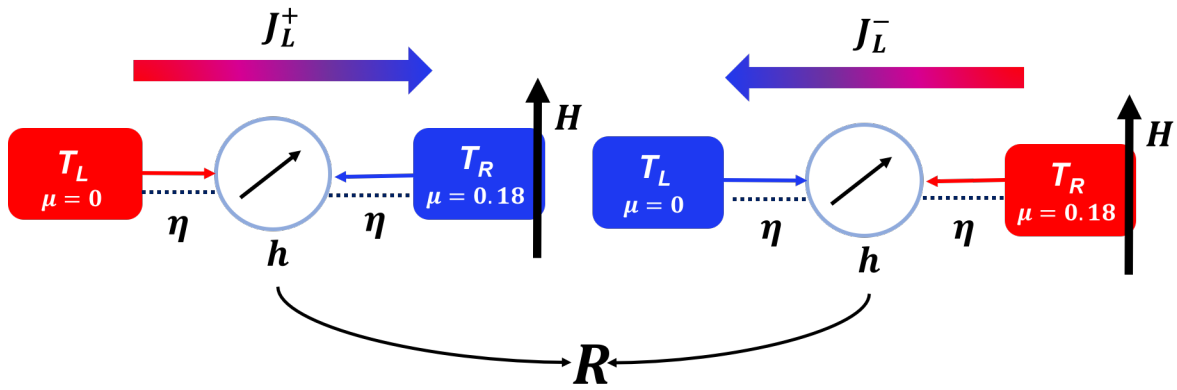
## 2.5. Configuración Aislante-Metal

Para esta configuración aislante-metal, el baño derecho  $R$  es metálico con  $\mu = 0.18\Lambda$  y el baño izquierdo  $L$  un aislante con  $\mu = 0\Lambda$ . Conociendo la forma de las tasas de transición para cada baño, es claro que la rectificación se ve visiblemente afectada dependiendo del baño al cual se le aplique el campo Zeeman. Este tipo de configuraciones se remiten a las configuraciones análogas en electrónica con los diodos tipo PN o NP, donde uno de los extremos es dopado para obtener una mayor conducción en una sola dirección. Por consiguiente, es conveniente el estudio del comportamiento de la corriente y la rectificación en ambos casos, cuando el campo es aplicado en el baño izquierdo y cuando es aplicado en el baño derecho.



### 2.5.1. Corriente cuando el campo Zeeman es aplicado en el metal

Motivados por los resultados obtenidos en las tasas de transición y corriente para las configuraciones anteriores, se exploró un sistema mixto, como muestra en la figura 2-17. Al tener un baño metálico y otro aislante, las tasas de transición para el baño derecho se comportan como se muestra en la figura 2-6, siendo el baño sometido a campo externo. En cuanto al baño izquierdo, la tasa estará representada por la curva con  $H = 0$  en la figura 2-8. La

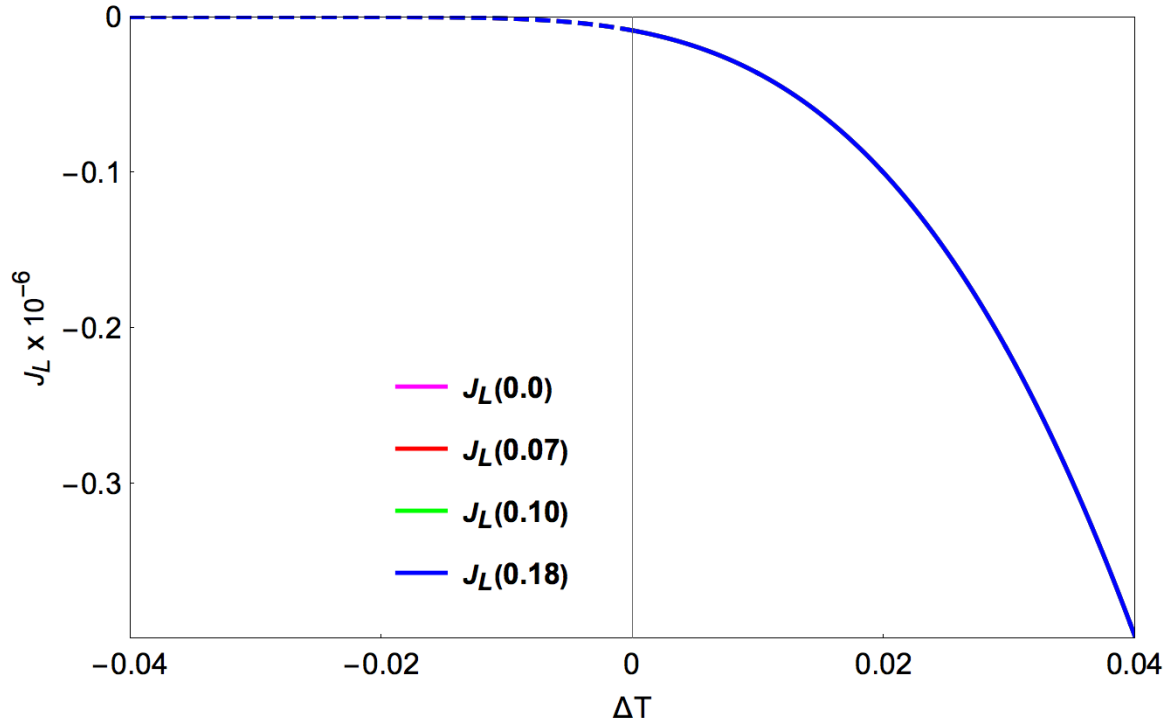


**Figura 2-17.:** Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración un qubit y dos reservorios. En este caso el baño izquierdo es aislante y el baño derecho es metálico con campo externo aplicado.

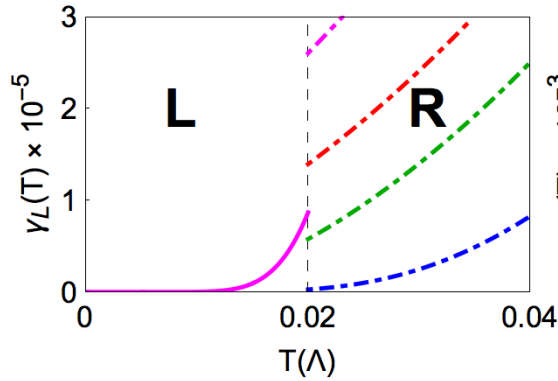
corriente para ambos sentidos  $J^-$  con líneas punteadas y  $J^+$  con líneas sólidas se muestra en la figura 2-18(a), junto con las respectivas tasas de transición para cada baño en las figuras 2-18(b) y 2-18(c). Igual que en las configuraciones anteriores, el análisis se divide en tres partes:

#### Aspectos generales

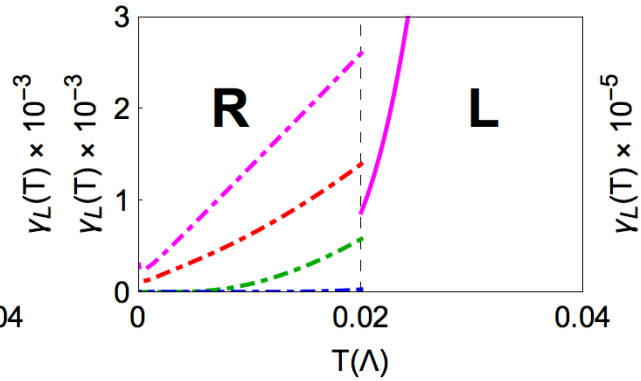
- En la figura 2-18(a) se observa que para ambas corrientes  $J^+$  y  $J^-$  en todos los valores de campo aplicado las curvas se solapan, esto se debe a que sus magnitudes son similares en todas las situaciones. Este comportamiento se explica observando en la figura 2-18(b) y 2-18(c) que las tasas con línea punteada para el baño  $R$  en ambos sentidos de la corriente se comportan de forma similar y su orden de magnitud respecto al baño  $L$  es dos órdenes mayor, y dado que  $J \propto 1/(1/\gamma_L + 1/\gamma_R)$ , el baño  $L$  domina el comportamiento de la corriente.
- También es notorio que  $J^+$  y  $J^-$  son no cero cuando  $\Delta T = 0$ . Esto se debe a que  $n_L(h, 0) \neq n_R(h, 0.18)$  y las tasas son diferentes de cero.
- Ambas corrientes  $J^+$  y  $J^-$  son negativas, esto significa que en ambos casos la transferencia de energía en el qubit se da hacia el nivel  $|e\rangle$  del estado excitado en el qubit.



(a)



(b)



(c)

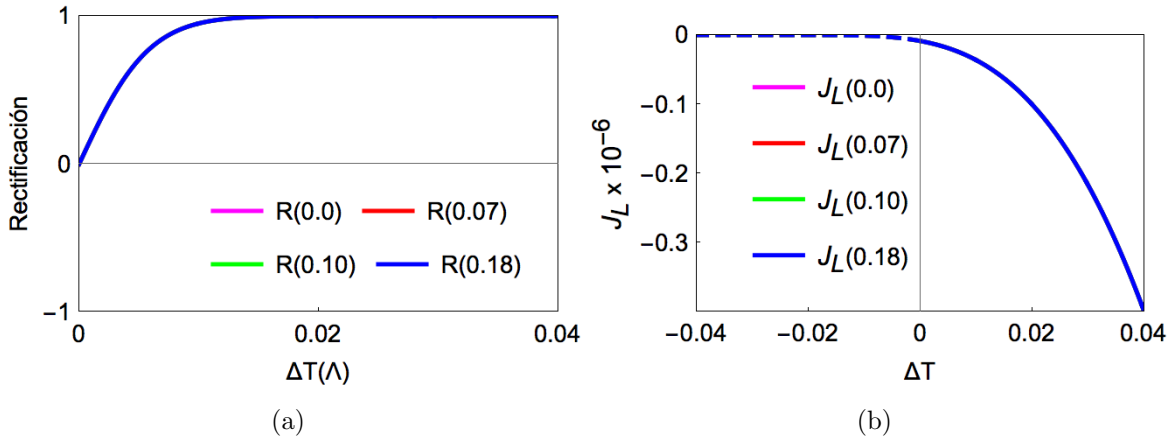
**Figura 2-18.:** Cambio de la corriente  $J_L^\pm$  al medida que aumenta la diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los reservorios y sus respectivas tasas de transición, cada curva representa un campo  $H$  distinto. La figura (a) muestra la corriente en ambas direcciones  $J^+$  y  $J^-$ , en este caso,  $\Delta T > 0$  corresponde a  $J^+$  y  $\Delta T < 0$  a  $J^-$ . En (b) se muestran las Tasas de transición en los baños  $L$  y  $R$  para la corriente  $J^-$  y en (c) las tasas de transición de probabilidad para  $J^+$ . Las tasas de transición para  $L$  en ambos casos son tres órdenes de magnitud menores que las tasas en  $R$

En la región  $\Delta T < 0$ , la figura 2-18(a) muestra una fuerte supresión de  $J^-$ , esto se debe a que la tasa para el baño aislante se vuelve rápidamente cero, ya que  $J \propto 1/(1/\gamma_L + 1/\gamma_R)$ . Físicamente, este resultado implica que el transporte de energía es dominado por el rápido

decaimiento de la tasa del baño aislante que es el de menor temperatura. Para  $\Delta T > 0$ , se observa que la corriente  $J^+$  crece de forma monótona conforme aumenta la diferencia de energía. Aquí, el baño de menor temperatura es el baño metálico y dado que las tasas no van a cero en este caso, la corriente tampoco se hará cero. En este intervalo, nuevamente el transporte de energía se ve dominado por el comportamiento del baño  $L$ .

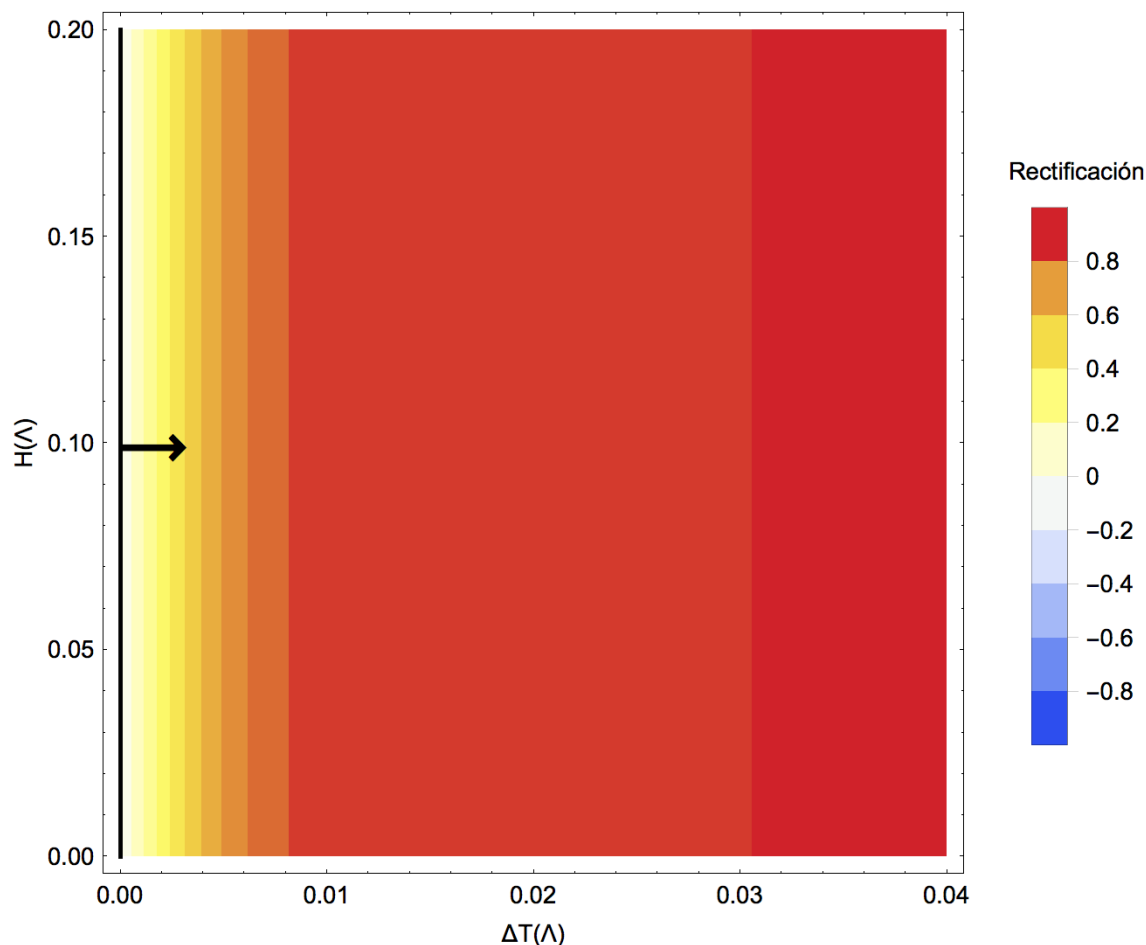
### Rectificación y NDTC

De la misma manera en que se analizó la corriente en las curvas de la figura 2-18, se presentan nuevamente en el gráfico 2-19(b) para ser contrastadas con la rectificación y se observa que si todas las corrientes iguales son iguales, la rectificación para los campos aplicados en la figura 2-19(a) son iguales, por tanto, todas las curvas se encuentran superpuestas. Teniendo en cuenta que  $J^- < J^+$ , se tiene rectificación positiva y dado que  $J^+$  crece rápidamente y  $J^+$  se suprime, la rectificación se hace máxima rápidamente. Ahora, la gráfica 2-20 muestra el mapa



**Figura 2-19.:** Rectificación y corriente en función de la diferencia de temperaturas entre los baños  $\Delta T$  para diferentes valores de  $H$  en una configuración aislante-metal cuando se aplica campo en el reservorio derecho. La figura (a) muestra la rectificación y la figura (b) muestra la corriente  $J^+$  y  $J^-$  en función de la diferencia de temperaturas. Solo se observa una de las curvas dado que todas ellas se encuentran superpuestas. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$

de calor de la rectificación en función del campo aplicado y la temperatura entre los baños. La figura 2-20 muestra también que la rectificación en todo el intervalo de temperatura es positiva, debido a que  $J^- < J^+$ . También, se observa que  $R$  es cero cuando  $H = 0$  y  $\Delta T = 0$ , ya que en este punto las corrientes son iguales. Luego, la rectificación alcanza rápidamente un valor del 80% a partir de  $\Delta T = 0.008$  aproximadamente; finalmente en el máximo de temperatura, la rectificación alcanza su máximo valor después de  $\Delta T = 0.03$ . Este resultado concuerda con el gráfico de corriente 2-18, ya que al ser la rectificación una comparación entre la corriente en cada sentido,  $J^-$  para  $\Delta T > 0$  disminuye mientras que  $J^+$



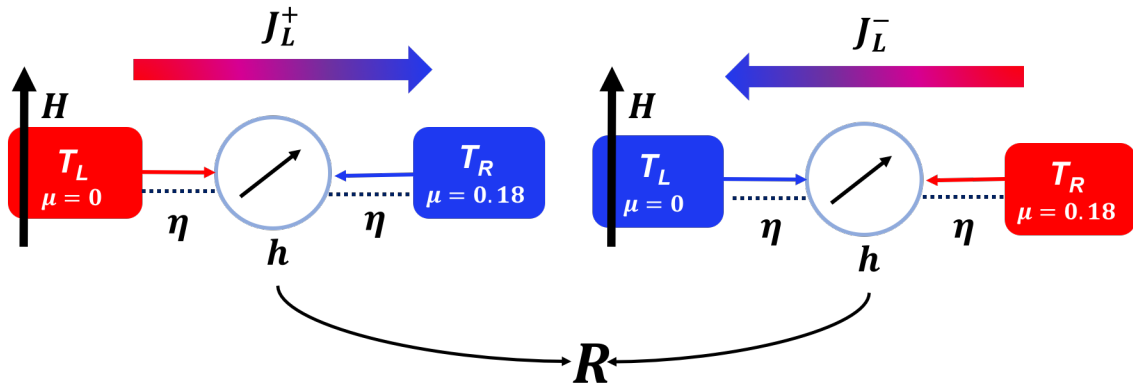
**Figura 2-20.:** Mapa de calor para la rectificación en función de  $\Delta T$  y  $H$ . En este caso, hay NDTC para todo el intervalo de temperatura.

incrementa, por tanto, la rectificación debe ser mayor a medida que la temperatura entre los baños aumenta.

En cuanto a la NDTC, nuevamente se observa en el gráfico **2-20** que esta se presenta en todo el intervalo  $\Delta T < 0$ , como lo indica la flecha negra en la figura. Dado esto, se concluye que se presenta NDTC para todo el mapa de calor para la rectificación, haciendo esta configuración un buen candidato a diodo térmico, ya que el transporte de calor en la dirección  $J^+$  no obedece solo a la diferencia de temperaturas en el sistema, si no también a propiedades del sistema en si. Vale resaltar que aunque el diodo mixto con campo aplicado en el baño metálico, presenta un comportamiento similar al diodo con ambos baños metálicos, pero el primero posee la ventaja de presentar la NDTC. Finalmente, es importante anotar que esta configuración también presenta altos factores de rectificación y NDTC sin campo aplicado, lo cual indica que la asimetría que genera el potencial químico es suficiente para dispositivos termotrónicos.

### 2.5.2. Corriente cuando el campo Zeeman es aplicado en el aislante

Ahora, se analiza la corriente y la rectificación cuando el baño derecho es sometido a un campo externo en esta configuración. Las tasas de transición se comportan como se muestra en la figura 2-8; en cuanto al baño izquierdo, la tasa estará representada por la curva con  $H = 0$  en la figura 2-6. Al igual que el caso anterior, la figura 2-22(a) muestra el cambio de



**Figura 2-21.:** Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración un qubit y dos reservorios. En este caso el baño derecho es metálico y el baño izquierdo es aislante con campo externo aplicado.

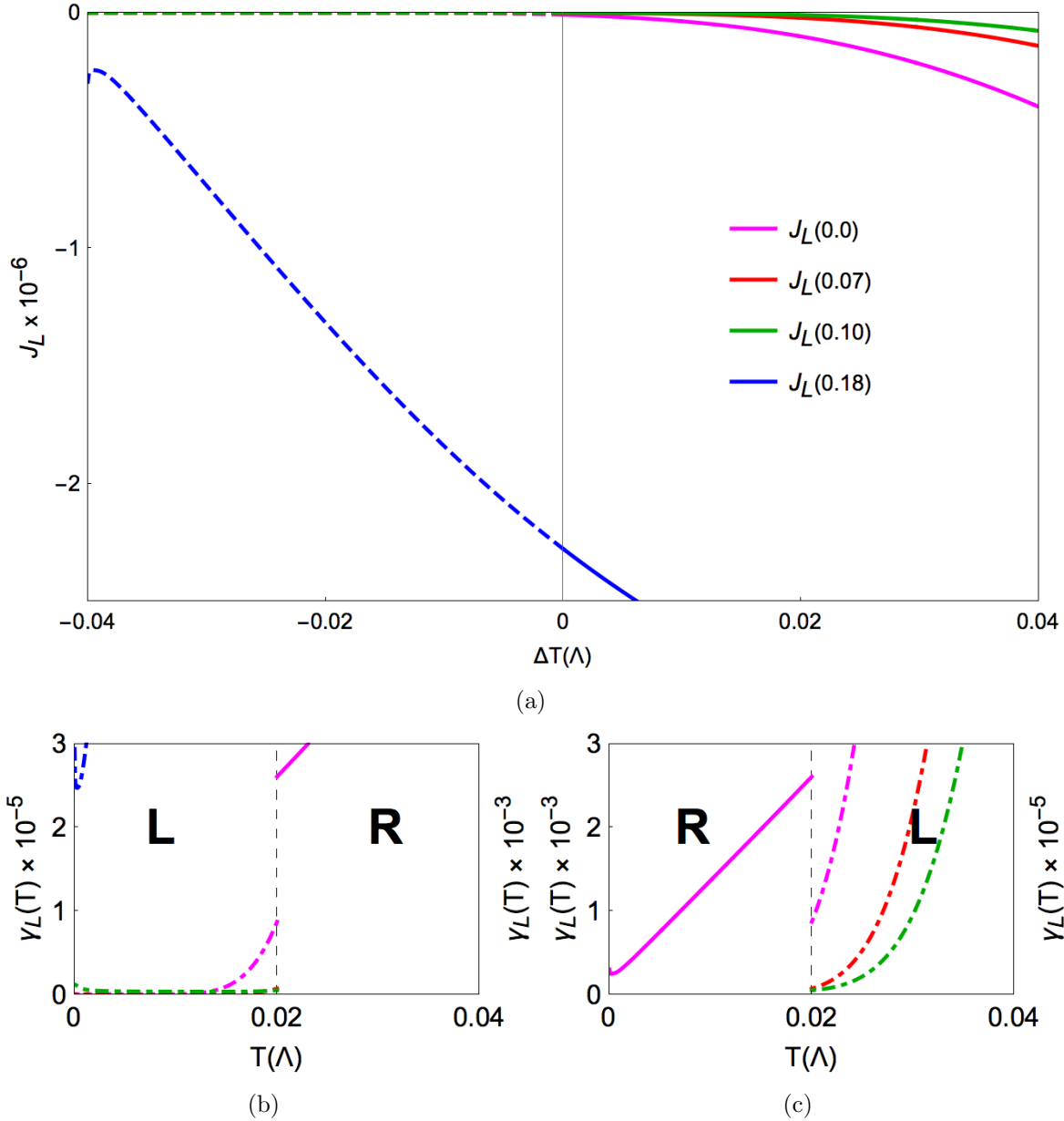
la corriente en los sentidos  $J^+$  con línea sólida y  $J^-$  con línea punteada cuando se incrementa la diferencia de temperatura entre ellos; mientras las figuras 2-22(b) 2-22(c) muestran las tasas de transición de probabilidad usadas en el cálculo de cada corriente.

#### Aspectos generales

- En la figura 2-22(a) las corrientes  $J^+$  y  $J^-$  son no cero cuando  $\Delta T = 0$ . Esto se debe a que  $n_L(h, 0.18A) \neq n_R(h, 0)$  y las tasas son diferentes de cero.
- Ambas corrientes son negativas esto significa que en ambos casos la transferencia de energía en el qubit se da hacia el nivel  $|e\rangle$  del estado excitado.
- Se observa que la corriente en ambos sentidos  $J^+$  y  $J^-$ , presentan los mismos régimen que se presenta en el reservorio aislante, que es donde se aplica el campo.

#### $\Delta T < 0$

- La corriente  $J^-$  en la figura 2-22(a) para los campos en el intervalo  $H < \Delta$ , son de magnitud reducida, dado que la magnitud de las tasas para el reservorio aislante son de muy pequeña magnitud en comparación con las del reservorio metálico, tal como se ve en la figura 2-22(b).



**Figura 2-22.:** Cambio de la corriente  $J_L^\pm$  al medida que aumenta la diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los reservorios y sus respectivas tasas de transición, cada curva representa un campo  $H$  distinto. La figura (a) muestra la corriente en ambas direcciones  $J^+$  y  $J^-$ , en este caso,  $\Delta T > 0$  corresponde a  $J^+$  y  $\Delta T < 0$  a  $J^-$ . En (b) se muestran las Tasas de transición en los baños  $L$  y  $R$  para la corriente  $J^-$  y en (c) las tasas de transición de probabilidad para  $J^+$ . Las tasas de transición para  $L$  en ambos casos son tres órdenes de magnitud menores que las tasas en  $R$

- Para  $H > \Delta$  la corriente tiene una magnitud mucho mayor que en el intervalo anterior, también, se explica gracias al cambio de magnitud en la tasa de transición del aislante.

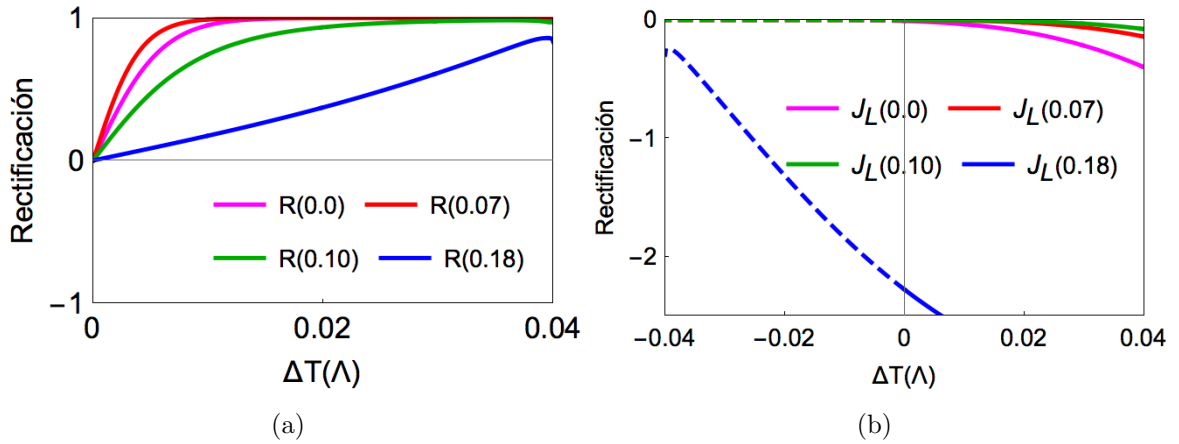
$\Delta T > 0$ 

- Para  $J^+$  en  $H < \Delta$ , la figura 2-22(c) muestra que las tasas son pequeñas y esto atenúa la corriente.
- En el intervalo  $H > \Delta$  las tasas tienen magnitudes parecidas, lo cual ocasiona el valor de la corriente se dispare y sea mucho mayor que la corriente en el régimen anterior.

Con este resultado, se grafica la rectificación y mapa de calor para la misma cuando se incrementa la temperatura entre los baños y el campo magnético aplicado.

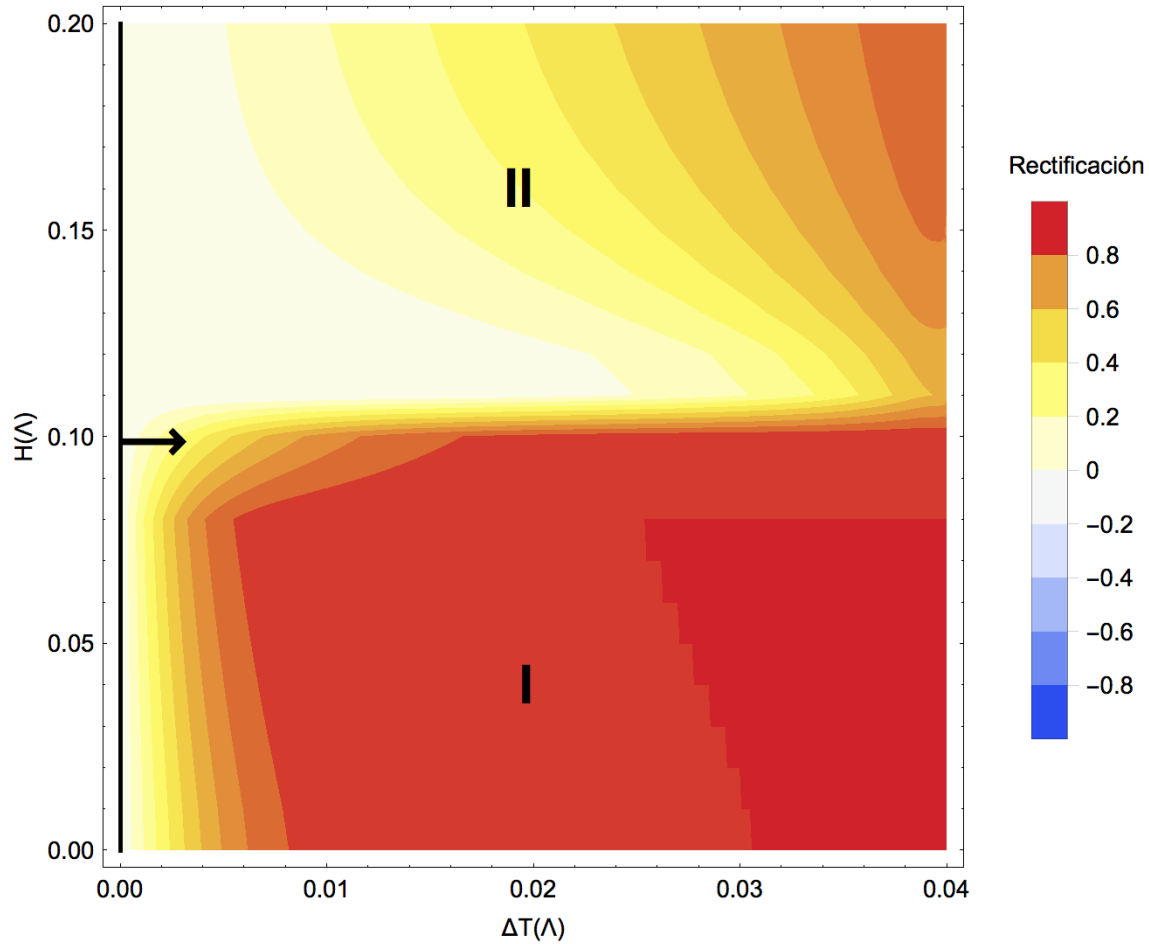
**Rectificación y NDTC**

La figura 2-23(a) ilustra el comportamiento de la corriente cuando se aplica campo Zeeman en el reservorio izquierdo. El gráfico 2-23(a) muestra que la rectificación en todo el intervalo



**Figura 2-23.:** Rectificación y corriente en función de la diferencia de temperaturas entre los baños  $\Delta T$  para diferentes valores de  $H$  en una configuración aislante-metal cuando el campo está aplicado en el reservorio izquierdo. La figura (a) muestra la rectificación y la figura (b) muestra la corriente  $J^+$  y  $J^-$  en función de la diferencia de temperaturas. Condiciones:  $\Delta = 0.1\Lambda$ ,  $h = 10^{-3}\Lambda$ ,  $\Lambda = 1\text{eV}$

de temperatura es positiva, debido a que  $J^- < J^+$  como muestra el gráfico 2-23(b). La rectificación es cero cuando  $H = 0$  y  $\Delta T = 0$ , dado que las corrientes en ambos sentidos son iguales en esta situación. Luego en el régimen  $H < \Delta$ , al aumentar la diferencia de temperatura entre los baños, la rectificación rápidamente alcanza un alto valor hasta llegar al máximo, dado que  $J^-$  en este intervalo se anula. Para  $H > \Delta$ , la rectificación es baja para  $\Delta T < 0.02$  debido a que ambas corrientes  $J^+$  y  $J^-$  tienen magnitudes similares. Al aumentar la diferencia de temperatura la rectificación aumenta hasta un 80% aproximadamente; esto sucede ya que en este intervalo  $J^-$  no se anula como sucedió en el régimen anterior.



**Figura 2-24.:** Mapa de rectificación en función de  $\Delta T$  y  $H$ .

También se ve que la rectificación se divide en dos zonas, la primera zona *I* corresponde a los campo  $H < \Delta$  tiene máxima rectificación, en cuanto a la NDTC y recordando el gráfico **2-22**, existe en todo el intervalo ya que  $J^-$  se suprime en todo  $\Delta T < 0$ . Para la zona *II*,  $H > \Delta$  y se observa que hay baja rectificación ya que  $J^+$  y  $J^-$  tienen magnitudes similares. También existe NDTC por la misma razón que se presenta en la zona *I*. Esto indica que esta configuración en el intervalo  $\Delta T$  para el régimen  $H < \Delta$ , es un buen candidato a diodo térmico.

Finalmente, revisadas todas las configuraciones se realizó una comparación entre ellas presentada en la tabla **2-1**, en la cual se resaltan las ventajas de cada configuración, las desventajas y algunas observaciones.



Configuración	Ventajas	Desventajas	Observaciones
Aislante-Aislante	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Control de corriente con campo magnético</li> <li>▪ Aplicabilidad en termotrónica</li> <li>▪ Presenta NDTC en una gran región</li> <li>▪ Alta rectificación (100 %) con campos bajos</li> </ul>	No todas las regiones tienen NDTC	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Esta configuración es candidata a ser diodo térmico por el alto factor de rectificación. También compuerta lógica, dado el switcheo que se presenta en la corriente.</li> <li>▪ Las regiones que se presentan dependen del gap</li> </ul>
Metal-Metal	Alta rectificación (80 %)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ La región de alta rectificación solo se presenta cuando el campo es igual al potencial químico</li> <li>▪ No presenta aplicación directa en el campo de la termotrónica</li> </ul>	Podría usarse para enfriar
Aislante-Metal con campo Zeeman en el metal	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ NDTC en todo el intervalo de temperatura</li> <li>▪ Alta rectificación (100 %) para todos los campos</li> <li>▪ Aplicabilidad en termotrónica</li> </ul>		
Aislante-Metal con campo Zeeman en el aislante	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ NDTC en todo el intervalo de temperatura</li> <li>▪ Alta rectificación (100 %) para campos bajos</li> <li>▪ Aplicabilidad parcial en termotrónica (Solo una región)</li> </ul>	Solo una región de alta rectificación	Las regiones que se presentan dependen del gap del aislante

**Tabla 2-1.:** Comparación entre las configuraciones propuestas

## 2.6. Conclusiones y perspectivas

El objetivo principal en este capítulo era controlar la corriente térmica en nanoestructuras híbridas usando la ingeniería de reservorios. Se estudio un sistema físico modelado por un qubit acoplado a dos baños térmicos con cuatro configuraciones para los baños: aislante-aislante, metal-metal y aislante-metal con campo en el baño derecho y aislante-metal con campo en el baño izquierdo. Se estudiaron las tasas de transición de probabilidad, la corriente, la rectificación y la NDTC, todos ingredientes importantes para comprender el transporte de calor y su posible aplicación. Para que haya rectificación se necesita que las corrientes  $J^-$  y  $J^+$  sean diferentes, esto se traduce en una diferencia en las tasas de transición. El enfoque típico en la literatura [29, 26] es modificar el sistema central (lo cual se hace en el capítulo 3) o introducir explícitamente una asimetría en los acoples. Nuestro enfoque es novedoso pues se basa en los reservorios y en cómo su naturaleza o la aplicación de un campo externo, puede tener implicaciones para la  $R$  y NDTC. Por trabajos anteriores, es claro que la naturaleza del reservorio - codificada en las tasas - está explícitamente en la evolución o en la dinámica del qubit [68], sin embargo, no hay ninguna razón a-priori para que una vez el sistema baño-qubit-baño llegue al estado asintótico y la corriente y  $R$  allí, dependan de las tasas y por ende de la estructura pero es el caso y se aprovechó en este trabajo.

En las configuraciones aislante-metal, metal-metal y aislante-aislante, (ver tabla **2-1**) se consideró campo magnético en el baño derecho e incluso aislante-metal con campo en el baño izquierdo. La conclusión es que con ese tipo de configuraciones se puede llegar a la rectificación máxima y al mismo tiempo tener NDTC. Esto implica una forma fácil e interesante de controlar el transporte de calor y también la posibilidad de modelar diferentes dispositivos. Las configuraciones aislante-aislante y aislante-metal pueden utilizarse como rectificadores o diodos que sabemos son el bloque fundamental en la termotrónica y el primer componente para pensar en transistores, compuertas, memorias, etc. Entre las configuraciones estudiadas, la que presenta mejores condiciones es la de aislante-metal con campo aplicado en el metal, esto porque en un  $\Delta T$  muy pequeño logra tener  $R = 1$  y tiene NDTC en todo el intervalo. También eventualmente la configuración aislante-aislante tiene buenas condiciones. De hecho, pareciera que la sola presencia de un gap o un material aislante propicia NDTC, es decir supresión en el flujo de energía en una de las direcciones.

Los resultados que aquí se presentan pueden ser utilizados directamente en experimentos que puedan ser modelados con sistemas de dos niveles como átomos artificiales y puntos cuánticos; pero a la vez, los materiales existentes pueden dar lugar a trabajos teóricos similares y a preguntas como ¿para un material con gap específico que campo externo se necesitaría aplicar para tener efecto diodo? Y también, cómo las distintas definiciones de corriente afectan el resultado? La aplicación es mucho más amplia de lo que alcanza a abarcar esta tesis y en el futuro se pueden hacer estudios en diversas direcciones:

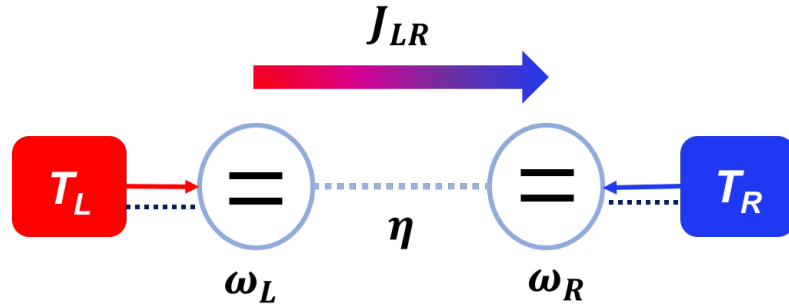
- 
- Entender la dinámica en el régimen transiente del qubit usando estas configuraciones, y cómo afecta esto la corriente y la rectificación. En el anexo A se encuentran las autoenergías para la solución de la dinámica completa.
  - Estudiar cómo cambia la corriente y la rectificación cuando se consideran acoples de otro tipo por ejemplo carga-carga con los mismos tipos de baños
  - Usar densidades de estado más realistas que dependan de la temperatura, como las presentadas en [9]. Aquí, debe tenerse en cuenta que el transporte térmico va acompañado de transporte electrónico.
  - Siguiendo en el campo de la termotrónica, un transistor térmico teniendo en cuenta una propuesta alternativa de la citada en la referencia [22], dónde se usa un sistema de tres qubits acoplados cada uno a baños térmicos independientes.
  - En el estudio de calor y trabajo en máquinas térmicas entender cómo usar el campo o la naturaleza del baño para lograr eficiencias mayores.

### 3. Corriente térmica en sistemas de dos niveles que interactúan entre sí

Hasta ahora se han propuesto configuraciones para dispositivos en termotrónica conformados por un subsistema central y dos reservorios. En estas configuraciones se acudió a la interacción entre el subsistema y los baños, así como también a un campo externo aplicado sobre uno de ellos para introducir asimetrías que propicien el direccionamiento preferencial de calor en una sola dirección. Esta no es la única opción que existe, de hecho, en la opción mas explorada en la literatura [35, 74, 34, 28, 6] usa modelos donde el subsistema central tiene formas más complejas, como cadenas de espines, introduciendo fuerzas externas en el qubit y también, interacción entre dos o más qubits con diversos tipos de acoplamiento entre ellos. Este capítulo desarrolla dos propuestas de dispositivos termotrónicos. El primero es un diodo térmico compuesto por dos qubits acoplados y un transistor térmico usando tres qubits acoplados. En ambas configuraciones los qubits se encuentran acoplados mediante la interacción Dzyaloshinskii-Moriya (DM), buscando tener Hamiltonianos que representen sistemas cuánticos más realistas, como la interacción entre puntos cuánticos. Las secciones están organizadas como sigue: la sección 3.1 se refiere al modelo usado en este capítulo, se muestra el Hamiltoniano usado en las dos configuraciones propuestas y se desarrolla la dinámica del sistema para llegar a la expresión de la corriente en el estado asintótico. La sección 3.2 muestra en detalle el análisis de la corriente y la rectificación para un diodo térmico, modificando sistemáticamente cada uno de los parámetros que caracterizan la interacción DM para así conocer la influencia que tiene cada uno sobre la corriente y la rectificación. En esta primera propuesta se encontró rectificación máxima acompañado de NDTC, mostrando que esta configuración es buena candidata a diodo térmico. Dado que el rectificador es el bloque fundamental de la termotrónica, la existencia de NDTC incentivó la exploración de una configuración para transistor térmico. La sección 3.3 explora la propuesta de dicho transistor y se estudiaron las tasas de transición, la corriente y el factor de amplificación térmica, aunque no se obtuvo un valor alto de amplificación en este caso. Finalmente, la sección 3.4 muestra las conclusiones y perspectivas del trabajo realizado a lo largo del capítulo.

### 3.1. Modelo

El sistema físico que se considera esta conformado por un subsistema compuesto por dos o más qubits acoplados, cada qubit se encuentra acoplado a un reservorio y dichos reservorios no interactúan entre sí, como muestra la figura 3-1 para dos qubits. En este modelo, los reservorios son bosónicos y el Hamiltoniano total del sistema se escribe como:



**Figura 3-1.:** Diagrama esquemático de un diodo térmico compuesto por dos qubits de frecuencia  $\omega_p$  que interactúan con una intensidad de acoplamiento  $\eta$ . Cada qubit está acoplado a un reservorio con diferente temperatura.

$$H_T = H_s + H_B + H_I. \quad (3-1)$$

Aquí, el Hamiltoniano libre de los baños, que en este caso representan una colección infinita de bosones y usando  $\hbar = 1$ , se escribe como

$$H_B^p = \sum_{pk} \omega_k a_k^{p\dagger} a_k, \quad (3-2)$$

donde  $a_k^{p\dagger}$  ( $a_k^p$ ) representan a los operadores de creación (aniquilación) del reservorio  $p = L, R$ .  $H_I^p$  representa el Hamiltoniano de interacción entre cada reservorio y su respectivo qubit del sistema central, y es modelado mediante la interacción espín-bosón descrita por la expresión

$$H_I^p = \sum_p \sigma_x^p \sum_p g_k \left( a_k^{p\dagger} + a_k \right). \quad (3-3)$$

El sistema central puede estar compuesto por dos o más qubits que interactúan; entonces este Hamiltoniano puede representar espines electrónicos confinados en puntos cuánticos. Debido a este confinamiento, se presenta interacción espín-espín y acoplamiento espín-órbita. El acoplamiento espín-órbita produce dos partes, una isotrópica que proviene de la interacción de intercambio entre electrones que pertenecen a estructuras que carecen de simetría de inversión y la parte anisotrópica que en su mayoría esta compuesta por una interacción llamada DM [75], que se expresa como:

$$H_s = \frac{\omega_L}{2} \sigma_z^L + \eta \chi (\sigma_L^+ \sigma_R^+ + \sigma_L^- \sigma_R^-) + \eta (1 + iD) (\sigma_L^+ \sigma_R^-) + \eta (1 - iD) (\sigma_L^- \sigma_R^+), \quad (3-4)$$

donde, sin pérdida de generalidad  $\omega_R = 0$ .  $\chi$  describe la anisotropía entre los qubits en el plano  $XY$  (anisotropía parcial con  $-1 \leq \chi \leq 1$ ), y  $D$  es el acoplamiento DM [76, 28]. El subíndice  $p$  denota cada qubit, en el caso del diodo térmico serán dos:  $L$  y  $R$ , para el transistor serán tres:  $L$ ,  $M$  y  $R$ . Esta interacción fue presentada por primera vez por Moriya [77] en 1960, cuando describió el ferro-magnetismo débil como una consecuencia del acoplamiento espín-órbita desde el formalismo desarrollado por Dzyaloshinskii [78] dos años atrás. Recientemente, el efecto de la interacción DM ha sido estudiado en nanotecnología para el modelamiento en dispositivos de almacenamiento, gracias a la estabilidad que genera en dominios magnéticos [59, 79, 80]. Debido a esto, se ha explorado el acoplamiento DM en dispositivos termotrónicos compuestos por qubits que presentan esta interacción [76, 28]. Chen *et al.* modeló un diodo térmico usando este acoplamiento para introducir asimetría entre los qubits [28], llegando a obtener un factor de rectificación del 70 %. Las escalas en este sistema son arbitrarias dado que se fija mediante la interacción y dependen en específico de qué se modele [81].

## 3.2. El diodo térmico

Para el diodo térmico, se estudia el flujo de energía entre dos qubits acoplados entre sí mediante la interacción DM; a su vez, cada qubit es acoplado a un reservorio térmico que no interactúa con los demás componentes del sistema completo, como se muestra en la figura **3-1**. Los estados de cada qubit se escriben  $|e\rangle_p$  para el estado excitado y  $|g\rangle_p$  para el estado base, mientras la base desacoplada  $|LR\rangle$  es descrita por los vectores  $|ee\rangle, |eg\rangle, |ge\rangle, |gg\rangle$ . Los auto-estados del sistema conjunto son encontrados mediante la diagonalización del Hamiltoniano, obteniendo un sistema de 4 niveles representado por los estados vestidos en términos de la base desacoplada y sus respectivas energías, que en orden ascendente son:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= A^+ \left( 2\eta|ge\rangle - \frac{(2\xi + \Delta)}{1 - iD}|eg\rangle \right), & \omega_1 &= -\xi \\
 |2\rangle &= B^+ (2\eta\chi|gg\rangle - 2(\delta + \zeta)|ee\rangle), & \omega_2 &= -\zeta \\
 |3\rangle &= B^- (2\eta\chi|gg\rangle - 2(\delta - \zeta)|ee\rangle), & \omega_3 &= \zeta \\
 |4\rangle &= A^- \left( 2\eta|ge\rangle + \frac{(2\xi - \Delta)}{1 - iD}|eg\rangle \right), & \omega_4 &= \xi.
 \end{aligned} \tag{3-5}$$

Aquí,

$$\xi = \frac{1}{2}(\delta^2 + 4\eta^2\chi^2)^{1/2}, \quad (3-6)$$

$$\zeta = \frac{1}{2}(\Delta^2 + 4\eta^2(1 + D))^{1/2}, \quad (3-7)$$

$$A^\pm = (4\eta^2 + (2\xi \pm \Delta)^2/(1 + D^2))^{-1/2}, \quad (3-8)$$

$$B^\pm = (4\eta^2\chi^2 + 4(\delta \pm \eta)^2)^{-1/2}, \quad (3-9)$$

con  $\Delta = \omega_L - \omega_R$ ,  $\delta = \frac{1}{2}(\omega_L + \omega_R)$ . Los estados vestidos muestran cuales son las transiciones permitidas, teniendo en cuenta que el hamiltoniano de los reservorios descrito en la ecuación 1-54 solo permite una transición a la vez, las transiciones permitidas en este sistema total serán  $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ ,  $|3\rangle \leftrightarrow |4\rangle$  con una energía de  $\lambda_- = \xi - \zeta$ , y las transiciones  $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ ,  $|2\rangle \leftrightarrow |4\rangle$  con una energía de  $\lambda_+ = \zeta + \xi$ , las demás transiciones están prohibidas, con probabilidad cero.

### 3.2.1. Dinámica asintótica

Para encontrar la dinámica asintótica del subsistema, en esta ocasión se parte desde la ecuación maestra en la forma de Lindblad y recordando la sección 1.1.3, es una ecuación que se encuentra bajo dos aproximaciones: la de Born-Markov para acoplamiento débil y la aproximación de onda rotante. Se tomó este formalismo dado que en este caso no es posible asegurar la positividad del operador densidad; además, en este tipo de sistemas se pueden presentar degeneraciones y la ecuación maestra de Pauli no puede ser calculada bajo esta condición. Así, la ecuación maestra en la forma de Lindblad se escribe como:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_{LS}(t), \rho_S(t)] + \sum_p \mathcal{D}_p[\rho_S(t)]. \quad (3-10)$$

Aquí,  $H_{LS} = S_{\alpha\beta}(\omega)A_\alpha^\dagger(\omega)A_\beta(\omega)$  es el Hamiltoniano de Lamb shift y  $A_\alpha = \sum_{i,j:\epsilon_j - \epsilon_i = \omega_{j-i}}$ . El conmutador  $[H_{LS}(t), \rho_S(t)] = 0$  y el disipador  $\mathcal{D}_p[\rho_S(t)]$  mostrado en la ecuación 1-21 se transforma en el súper-operador de Lindblad  $\mathcal{L}_p[\rho_S(t)]$  cuando las tasas  $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$  son diagonalizadas, teniendo en cuenta que las tasas de transición de probabilidad indican la dirección del flujo de energía en el sistema, son definidas como:

$$\gamma_{j-i}^p = \mathcal{J}(\omega_{j-i})[(1 + n_\omega^p)\rho_{jj} - n_\omega^p\rho_{ii}], \quad (3-11)$$

con  $\omega_{j-i} = \omega_j - \omega_i$ ,  $\rho_{ii} = \langle i|\rho|i\rangle$  como la población del nivel  $|i\rangle$ ; además,  $-\gamma_{j-i} = \gamma_{i-j}$ . El término  $\mathcal{J}(\omega_{j-i})$  es la densidad espectral, representa los estados acoplados en el dominio de la frecuencia y es la transformada de Fourier de la función de auto-correlación en cada qubit. El término  $n_\omega^p = [\exp(\omega\beta) - 1]^{-1}$  es la ocupación térmica y se ha tomado  $\beta = 1/T_p$  con  $k_B = 1$ .

Observando la tasa de transición de probabilidad es importante resaltar que es similar a la expresión para las tasas de transición de probabilidad calculadas en el capítulo 2, donde dicha tasa de transición depende de la función de correlación en los baños y la ocupación térmica, llevando a una dependencia explícita de la corriente y la tasa. Finalmente, el súper-operador de Lindblad se escribe como

$$\mathcal{L}_p[\rho_S] = \sum_{\omega \geq 0} \mathcal{J}(\omega_{j-i}) \left[ (1 + n_\omega^p) \left( A_p(\omega) \rho_s(t) A_p^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{A_p^\dagger(\omega) A_p(\omega), \rho_s(t)\} \right) \right. \\ \left. n_\omega^p \left( A_p^\dagger(\omega) \rho_s(t) A_p(\omega) - \frac{1}{2} \{A_p(\omega) A_p^\dagger(\omega), \rho_s(t)\} \right) \right]. \quad (3-12)$$

Estando en el estado asintótico, el régimen esta definido por  $d\rho/dt = 0$  y con esto, la ecuación 3-10 será  $\mathcal{L}_p[\rho_S(t)] = 0$  y usando la definición 1-39, la corriente para el sistema queda:

$$J_p = \text{Tr}(\mathcal{L}_p[\rho_S(t)] H_s) = 0 \quad (3-13)$$

Es claro de la ecuación 3-13 que en el estado asintótico hay conservación de la energía con  $J_L = -J_R$ . Para encontrar entonces la corriente, es necesario calcular el súper-operador de Lindblad definido en la ecuación 3-12, que depende a su vez de los operadores  $A_p(\omega)$ . Definidos los estados vestidos del sistema mostrados en la ecuación 3-5 y sabiendo que las  $\omega_p \geq 0$  en el sistema son  $2\xi$ ,  $2\eta$ ,  $\xi + \eta$  y  $\xi - \eta$  se calculó  $A_p(\omega)$ :

$$A_p(\omega) = A_p(0) + A_p(2\xi) + A_p(2\eta) + A_p(\xi + \eta) + A_p(\xi - \eta) \\ = a_p|1\rangle\langle 2| + b_p|3\rangle\langle 4| + c_p|1\rangle\langle 3| + d_p|2\rangle\langle 4|. \quad (3-14)$$

Aquí, los coeficientes  $a_p$ ,  $b_p$ ,  $c_p$  y  $d_p$  provienen de los coeficientes de orto-normalización de los estados vestidos, su expresión completa se encuentra en el anexo B. Es evidente en esta última ecuación para los operadores que ambos qubits en el sistema central tienen el mismo tipo de transiciones permitidas; también, se observa que estas transiciones son las mismas que se predijeron en los estados vestidos, por esta razón,  $A_p(0) = A_p(2\xi) = A_p(2\eta) = 0$ , y corresponden a transiciones de doble excitación. Teniendo esta expresión se calcula el súper-operador de Lindblad y trazando sobre los grados de libertad del sistema total, se obtiene que

$$J_p = \text{Tr}(\mathcal{L}_p[\rho_S] H_s) = \sum_{i=1}^4 \langle i | \mathcal{L}_p[\rho_S(t)] H_s | i \rangle \\ = \omega_1 (a_p a_p^* \gamma_{2-1}^p + c_p c_p^* \gamma_{3-1}^p) + \omega_2 (-a_p a_p^* \gamma_{2-1}^p + d_p d_p^* \gamma_{4-2}^p) + \\ \omega_3 (b_p b_p^* \gamma_{4-3}^p - c_p c_p^* \gamma_{3-1}^p) + \omega_4 (-b_p b_p^* \gamma_{4-3}^p + d_p d_p^* \gamma_{4-2}^p). \quad (3-15)$$

Reorganizando y haciendo  $a_p a_p^* = \alpha_p$ ,  $b_p b_p^* = \beta_p$ ,  $c_p c_p^* = \gamma_p$ ,  $d_p d_p^* = \delta_p$  se obtiene la expresión de la corriente para el diodo térmico:

$$J_p = -\lambda_- (\alpha_p \gamma_{2-1}^p + \beta_p \gamma_{4-3}^p) - \lambda_+ (\gamma_p \gamma_{3-1}^p + \delta_p \gamma_{4-2}^p). \quad (3-16)$$



Finalmente, la expresión de los coeficientes  $\alpha_p$ ,  $\beta_p$ ,  $\gamma_p$  y  $\delta_p$  se encuentra en el anexo B. Estos coeficientes contienen la dependencia de la dinámica del sistema con la interacción DM y no dependen de la temperatura de los reservorios. También, esta expresión corrobora que el flujo de energía medido en este caso obedece al transporte de calor entre niveles acoplados en el sistema conjunto.

Es claro a partir de la ecuación 3-16, que la corriente depende explícitamente del cambio que se produce en las tasas de transición de probabilidad. Debido a esto, entender el comportamiento de estas tasas de transición facilita comprender el comportamiento de la corriente. En este capítulo, de nuevo se usó la estrategia aplicada en el capítulo anterior, donde el análisis de resultados se hizo de forma sistemática de acuerdo a la figura 2-4. Primero se estudian las tasas de transición de probabilidad; luego, la corriente y la rectificación térmica. La siguiente sección analiza entonces el cambio de las tasas de transición con la temperatura y su dependencia con los parámetros que influyen en la interacción del sistema.

### Consideraciones generales para el análisis de las tasas, corrientes, rectificación y NDTC

Las tasas de transición de probabilidad, según la ecuación 3-11 para cada uno de los baños dependen de las ocupaciones (de esta forma las tasas dependen de la temperatura del respectivo baño) pero también del operador densidad del subsistema de qubits en el estado asintótico. Dicho operador,  $\rho_{ii}$  se calcula usando la ecuación de Lindblad 3-10, que tiene información sobre ambos reservorios y ambas temperaturas. Esto implica que la tasa de transición para el baño  $L$  depende de las temperaturas de ambos baños ( $T_L$  y  $T_R$ ) y sucede lo mismo para el baño  $R$ . Esta dependencia hace que las tasas de transición de probabilidad sean diferentes del caso anterior (capítulo 2) y se debe al método de solución tomado en cada modelo considerado. Por tal razón a continuación se grafica en las figuras 3-2, 3-3, 3-4 y 3-5, las tasas en función de ambas temperaturas. En cuanto a las corrientes, tal y como se consideró en el capítulo anterior,  $J_+$  considera el caso  $T_L > T_R$  (tasas de las figuras 3-2 y 3-3) y  $J_-$  considera el caso  $T_R > T_L$  (tasas de las figuras 3-4 y 3-5). Es importante entender cómo cambian las tasas en función de interacción DM entre los dos qubits, es decir en función de los parámetros que la caracterizan que son  $D$  y  $\chi$ . Las figuras 3-6 y 3-7 muestran este comportamiento para los dos sentidos de la corriente. Se realiza lo mismo para la anisotropía en las figuras 3-8 y 3-9.

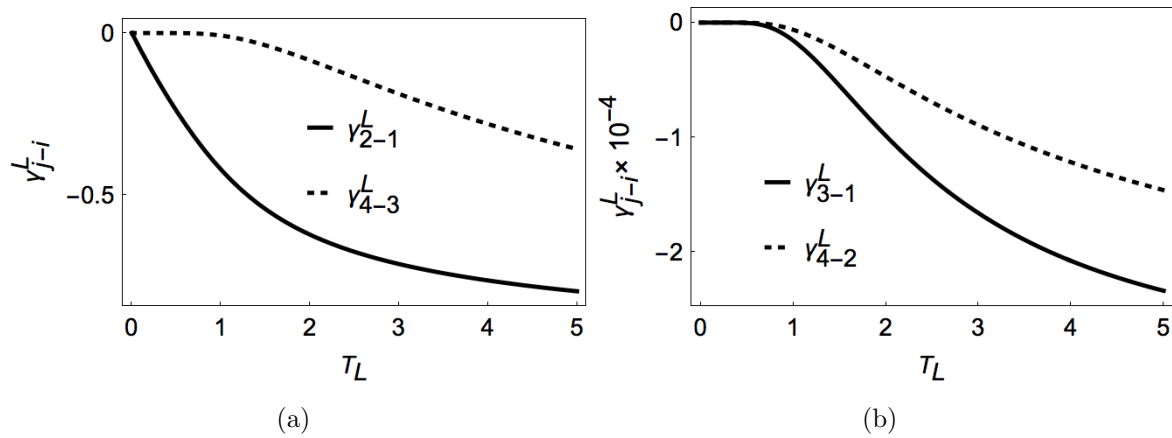
#### 3.2.2. Tasas de transición de Probabilidad

Como se dijo en la sección anterior, para entender mejor el cambio en la corriente es necesario analizar las tasas de transición y su comportamiento al incrementar la temperatura, ya que la corriente definida en la ecuación 3-16, depende directamente de los cambios que se generan

en dichas tasas, tal como ocurrió en el capítulo 3 con el sistema de un qubit acoplado a dos reservorios. Además, es importante anotar que las tasas dependen de cual baño esté a mayor temperatura, debido a la relación entre  $\gamma_{j-i}^p$  y el operador densidad, como se ve en la ecuación 3-11.

### Dirección positiva del flujo térmico cuando $T_L > T_R$

La figura 3-2, muestra el cambio de las tasas de transición de probabilidad expresadas en la ecuación 3-11 en función de la temperatura para el reservorio <sup>1</sup>  $L$ . En general, en la figura



**Figura 3-2.:** Tasa de transición en reservorio izquierdo  $L$  cuando se incrementa la temperatura del baño, con  $T_L > T_R$ . La figura (a) muestra las tasas de transición  $\gamma_{2-1}$  y  $\gamma_{4-3}$ , mientras que  $\gamma_{3-1}$  y  $\gamma_{4-2}$  en la figura (b). Las condiciones para el sistema en este caso son  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ .

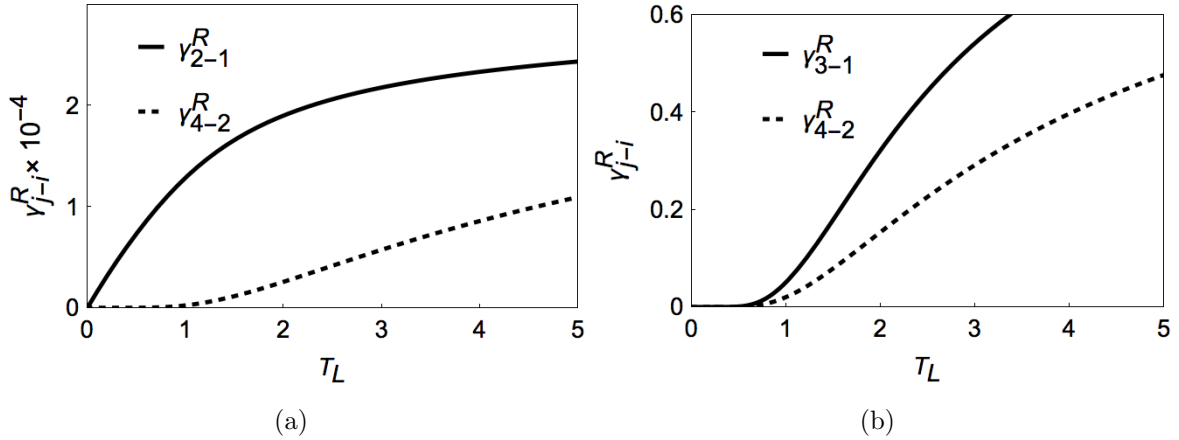
3-2 si  $\gamma_{j-i}$  es negativa implica que la transición va de  $i$  a  $j$ , indicando que la transferencia de energía se está efectuando del nivel  $i$  a  $j$  a medida que aumenta la temperatura, como se mencionó anteriormente. En el caso que la tasa sea positiva, entonces la transferencia se efectúa en la dirección indicada en los índices. Esto también da cuenta de la simetría del proceso que se efectúa, dado que la diferencia de energía entre dos niveles determinados  $i - j$  es la misma, sin importar la dirección en la cual se genera la transferencia de energía. Lo que si importa es la temperatura a la cual se efectúa el proceso en el baño asociado a cada qubit, ya que este flujo podría verse “bloqueado” en alguno de ellos y es allí donde se produce una dirección de flujo preferencial. Esto aplica para todas las figuras presentadas a continuación.

La figura 3-2(a) muestra el comportamiento  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{4-3}^L$ , ambas con diferencia de energía de  $\lambda^-$ . Ambas tasas son negativas y tienen un decrecimiento monótono a medida que aumenta  $T_L$ . Para bajas temperaturas, se aprecia que  $\gamma_{4-3}^L$  es muy pequeño y en los datos numéricos

<sup>1</sup>De ahora en adelante, se usará la palabra baño y reservorio de igual forma.

se verificó que es veinte órdenes de magnitud menor que  $\gamma_{2-1}^L$ , por lo cual puede despreciarse; esto significa que en este intervalo la transición  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$  domina la transferencia de energía. Después, ambas tasas tienen órdenes de magnitud comparables. En cuanto a las tasas  $\gamma_{3-1}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$ , en la figura 3-2(b) se ilustra su comportamiento a medida que se incrementa la temperatura. Estas tasas también tienen signo negativo, indicando que la transferencia de energía se da de  $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$  y de  $|2\rangle \rightarrow |4\rangle$ . Al aumentar la temperatura del baño, su magnitud crece hasta  $10^{-4}$ . En ambos gráficos 3-2(a) y 3-2(ab), las tasas  $\gamma_{3-1}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$  para temperaturas cercanas a cero son varios órdenes de magnitud más pequeños comparados con  $\gamma_{2-1}^L$ , por lo cual se consideran despreciables, implicando que en este intervalo los niveles  $|3\rangle$  y  $|4\rangle$  tienen una baja ocupación. Por esta razón se concluye que la transición entre los niveles  $|2\rangle \leftrightarrow |1\rangle$  dominan el transporte de energía en el baño izquierdo para este régimen.

Para el baño derecho, la figura 3-3 muestra el cambio de las tasas de transición de probabilidad cuando se aumenta la temperatura del baño izquierdo  $L$ . En la figura 3-3(a), se



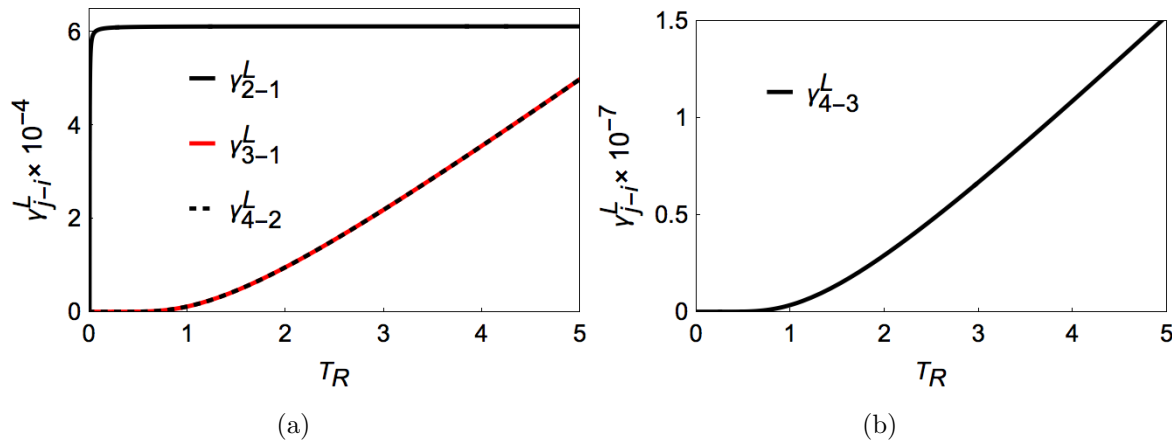
**Figura 3-3.:** Tasa de transición en el reservorio derecho  $R$  cuando se incrementa la temperatura del baño izquierdo, con  $T_L > T_R$ . En la figura (a) se grafica  $\gamma_{2-1}^R$  y  $\gamma_{4-3}^R$  y en la (b)  $\gamma_{3-1}^R$  y  $\gamma_{4-2}^R$ . Condiciones:  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ .

graficó el comportamiento de las tasas  $\gamma_{2-1}^R$  y  $\gamma_{4-3}^R$  para el baño derecho  $R$ . Ambas tasas son positivas, indicando que los niveles inferiores se están poblando a medida que aumenta la temperatura, de forma contraria a los niveles en el reservorio izquierdo. Aquí, también se presenta crecimiento monótono para ambas tasas. En el intervalo de baja temperatura ocurre lo mismo que se observó en el baño izquierdo,  $\gamma_{2-1}^R \gg \gamma_{4-3}^R$ , indicando que en este intervalo la transición  $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$  domina el transporte de energía en el baño derecho. Al incrementar la temperatura del baño izquierdo  $\gamma_{4-3}^R$  crece hasta ser equiparable a  $\gamma_{2-1}^R$ . El comportamiento de  $\gamma_{3-1}^R$  y  $\gamma_{4-2}^R$  es presentado en la figura 3-3(b). Estas tasas también son positivas, y para ambas tasas cuando la temperatura es cercana a cero, su orden de magnitud es despreciable debido a que son mucho menores comparadas con  $\gamma_{2-1}^R$ . Nuevamente, para temperaturas más altas las tasas aumentan. En conjunto, al comparar los gráficos 3-2 y 3-3 en el intervalo de

baja temperatura, se observa que la transferencia de energía está dominada por la transición  $|2\rangle \leftrightarrow |1\rangle$  en ambos baños, ya que las demás tasas pueden ser despreciadas debido a la baja ocupación térmica en los niveles  $|3\rangle$  y  $|4\rangle$ . Además,  $\gamma_{2-1}^L > \gamma_{2-1}^R$  indicando que el transporte de energía cuando  $T_L > T_R$  en su mayoría va de  $L$  a  $R$ . Esta baja ocupación se interpreta como una supresión en los niveles  $|3\rangle$  y  $|4\rangle$ , lo cual resulta conveniente a la hora de estudiar rectificación. Finalmente, al aumentar la temperatura el flujo térmico tiene contribuciones de todas las transiciones permitidas.

### Dirección negativa del flujo térmico cuando $T_L < T_R$

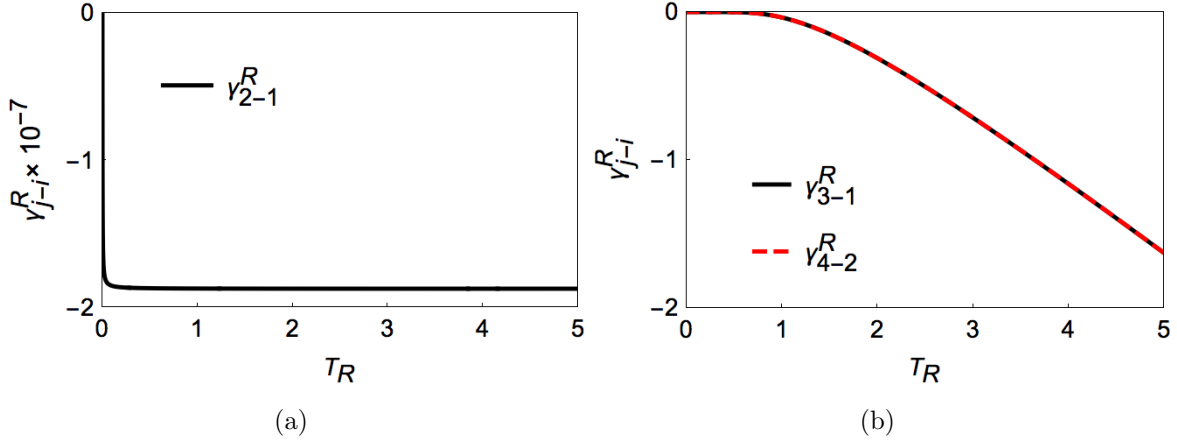
Ahora, para  $T_L < T_R$  la figura 3-4 muestra el cambio de las tasas para el reservorio izquierdo  $L$  cuando se aumenta la temperatura del baño derecho  $R$ . La figura 3-4(a) muestra el



**Figura 3-4.:** Tasa de transición en el reservorio  $L$  cuando se incrementa la temperatura del baño derecho  $R$  expresada en la ecuación 3-11, con  $T_R > T_L$ . En la figura (a) se dibujan las tasas de transición  $\gamma_{2-1}^L$ ,  $\gamma_{3-1}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$ , mientras que la figura (b) muestra la tasa de transición  $\gamma_{4-3}^L$ . Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_L = 10^{-3}$ .

comportamiento de  $\gamma_{2-1}^L$ ,  $\gamma_{3-1}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$ . En este caso, todas las curvas son positivas, lo cual indica que la transferencia de energía se da hacia los niveles inferiores. En todo el intervalo de temperatura  $\gamma_{3-1}^L = \gamma_{4-2}^L$  y en un inicio para temperaturas cercanas a cero, al igual que la situación anterior, los órdenes de magnitud para  $\gamma_{3-1}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$  son mucho menores que el de  $\gamma_{2-1}^L$ , considerándose despreciables. Mirando el gráfico  $\gamma_{2-1}^L$ , éste se satura con un mínimo aumento de temperatura y se mantiene constante en todo el rango. Luego,  $\gamma_{3-1}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$  crecen hasta ser similares a  $\gamma_{2-1}^L$ , indicando que a temperaturas mayores las transiciones  $|2\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ ,  $|3\rangle \leftrightarrow |1\rangle$  y  $|4\rangle \leftrightarrow |2\rangle$  aportan de forma significativa al transporte de calor. La figura 3-4(b) ilustra el comportamiento de  $\gamma_{4-3}^L$ , se observa que la tasa tiene un comportamiento monótono creciente, pero su orden de magnitud es 4 órdenes menor en comparación con las demás tasas, por lo cual se considera que no aporta significativamente en el transporte de

calor en todo el rango de temperatura. Para el reservorio derecho en este régimen, la figura 3-5 muestra el comportamiento de las tasas al incrementar la temperatura del baño derecho. En la figura 3-5(a) las tasas tienen signo negativo, indicando que la transferencia de energía



**Figura 3-5.:** Tasa de transición en los reservorios cuando se incrementa la temperatura del baño derecho  $R$  expresada en la ecuación 3-11, con  $T_R > T_L$ . En la figura (a) se trazan las tasas de transición  $\gamma_{2-1}$  y  $\gamma_{4-3}$  en el baño izquierdo, la figura (b) muestra las tasas de transición  $\gamma_{2-1}$  y  $\gamma_{4-3}$  para el baño derecho. Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_L = 10^{-3}$ .

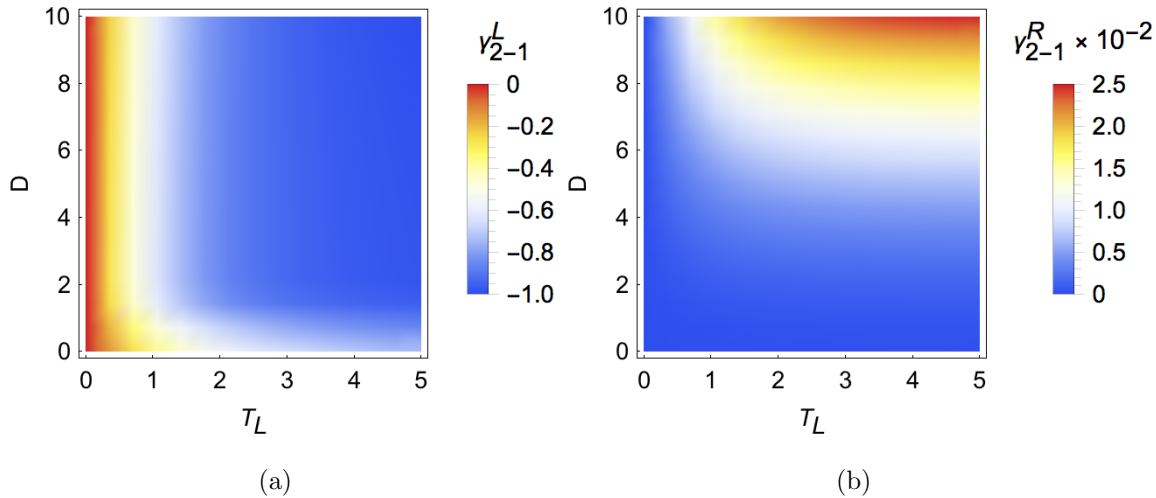
va de los niveles inferiores a los niveles superiores. Es inmediato notar que  $\gamma_{2-1}^R$  se satura con un aumento mínimo de la temperatura, como sucedió en el reservorio izquierdo. En el caso de  $\gamma_{4-3}^L$  el orden de magnitud es mucho menor al de las demás tasas en todo el intervalo de temperatura, por tanto no se considera relevante. La figura 3-5(b) muestra la variación de  $\gamma_{3-1}^R$  y  $\gamma_{4-2}^R$ . Estas tasas se muestran iguales en todo el rango de temperatura, son negativas y tienen un comportamiento monótono decreciente, tal como sucedió en el reservorio izquierdo. Al analizar el conjunto de gráficos, se observa que para bajas temperaturas en ambos baños la transferencia de energía se debe a la transición  $|2\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ , pero  $|\gamma_{2-1}^L| > |\gamma_{2-1}^R|$  indicando que el transporte de energía efectivo se realiza en su mayoría de  $L$  a  $R$ . También, es importante anotar que las tasas  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{2-1}^R$  tienen una magnitud constante en todo el rango de temperatura, lo que indica también una supresión en la transición de probabilidad. Los gráficos 3-2, 3-3, 3-4 y 3-5 muestran un comportamiento marcado que divide los gráficos en dos zonas o regímenes: la primera como baja temperatura donde la ocupación térmica para los niveles  $|3\rangle$  y  $|4\rangle$  son muy bajas, entonces las tasas de transición relacionadas con estos niveles son despreciables. Bajo esta premisa, se define como baja temperatura al intervalo que cumple con la condición

$$T_{corte} < \frac{(\omega_L + \omega_{2-1})}{\ln(1 + \frac{1}{\epsilon})}. \quad (3-17)$$

Aquí,  $\epsilon$  determina la precisión de la aproximación, mientras más pequeño sea este parámetro, mejor definido estará el intervalo. La segunda zona será la de alta temperatura y se define para las temperaturas mayores a  $T_{corte}$ . Ahora, para conocer completamente el comportamiento del sistema, se analiza el cambio de las tasas bajo la influencia de las variables definidas en la interacción DM: Anisotropía ( $\chi$ ) y fuerza de acoplamiento DM ( $D$ ).

### Fuerza de acoplamiento $D$ de la interacción DM cuando $T_L > T_R$

En la sección anterior se mostró el cambio de las tasas de transición de probabilidad con la temperatura de los baños. Ahora, la figura 3-6 muestra el mapa de calor para las tasas  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{2-1}^R$  en función de la temperatura del baño izquierdo  $T_L$ , cuando se incrementa la fuerza de acoplamiento DM entre los qubits. En cuanto a las demás tasas en ambos baños, se omite su representación ya que comportamiento es similar al presentado en los gráficos 3-2 y 3-3 con  $D = 0$ , concluyendo que el acoplamiento DM no ejerce un cambio significativo en ellas, esto implica que el transporte de energía entre dichos niveles no se ve afectado. Para la figura 3-



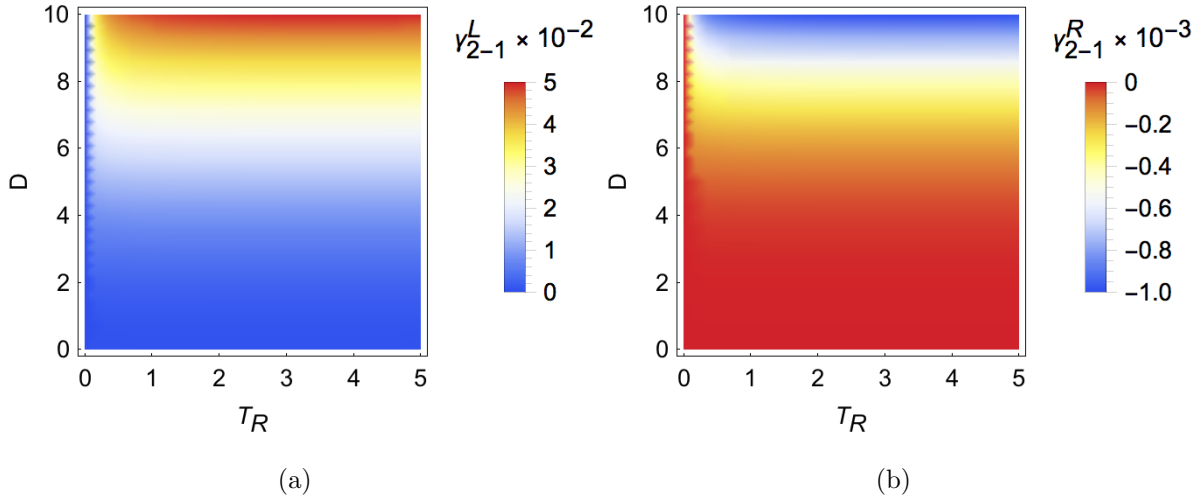
**Figura 3-6.:** Mapa de calor para las tasas de transición de probabilidad  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{2-1}^R$  cuando se incrementa la fuerza del acoplamiento DM, cuando  $T_L > T_R$ . En la figura (a) muestra la tasa de transición  $\gamma_{2-1}^L$  en el baño izquierdo y la figura (b) muestra la tasa de transición  $\gamma_{2-1}^R$  para el baño derecho. El mapa de colores para ambos gráficos indica que el color rojo muestra las zonas donde la tasa es máxima y el azul cuando es mínima. Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ .

6(a) muestra el mapa de  $\gamma_{2-1}^L$  al incrementar la fuerza del acoplamiento. Para ambos gráficos, el código de colores indica que el rojo muestra las zonas donde la tasa es máxima y el azul cuando es mínima. La zona para  $D = 0$ , coincide con lo visto en el gráfico 3-2(a), donde  $\gamma_{2-1}^L$  empieza en cero y disminuye de forma monótona en todo el rango de temperatura. Cuando se incrementa el acoplamiento DM entre los qubits, la tasa mantiene este comportamiento en

todo el rango de  $D$ . Es notorio que en el eje de la temperatura el comportamiento se divide en los dos regímenes, lo cual implica que la fuerza del acoplamiento no afecta la tasa  $\gamma_{2-1}^L$  cuando  $T_L > T_R$ . En el gráfico **3-6(b)**, se muestra el mapa de rectificación para la tasa  $\gamma_{2-1}^R$ . Nuevamente, se observa que el comportamiento para  $D = 0$  coincide con el gráfico **3-3(a)**, en el cual  $\gamma_{2-1}^R$  aumenta pero su magnitud es pequeña, del orden de  $10^{-4}$ . Al aumentar  $D$ , la tasa incrementa hasta dos órdenes de magnitud en comparación con el intervalo de baja temperatura.

### Fuerza de acoplamiento $D$ de la interacción DM si $T_L < T_R$

La figura **3-7** muestra el mapa de calor para las tasas  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{2-1}^R$  en función de la temperatura del baño derecho  $T_R$ , cuando se incrementa la fuerza de acoplamiento DM entre los qubits. Igual que en el caso anterior, solo se muestra para las tasas de transición  $\gamma_{2-1}^p$ , y para las demás tasas en ambos baños, se omitió su representación ya que comportamiento es similar al presentado en los gráficos **3-4** y **3-5** con  $D = 0$ .



**Figura 3-7.:** Mapa de calor para la tasa de transición de probabilidad cuando se incrementa la temperatura del baño derecho  $R$  y la fuerza de acoplamiento de la interacción DM, con  $T_R > T_L$ . En la figura (a) se muestra la tasa de transición  $\gamma_{2-1}^L$  y la figura (b) muestra las tasas de transición  $\gamma_{2-1}^R$  para el baño derecho. La figura (c) Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_L = 10^{-3}$ .

Para la figura **3-7(a)** se ilustra la tasa  $\gamma_{2-1}^L$ . Para  $D = 0$ , el mapa corresponde a lo visto en la figura **3-4(a)**, dónde la tasa tiene un orden de magnitud de  $10^{-4}$  y se mantiene constante en todo el rango de temperatura. Al aumentar  $D$ , la tasa incrementa lentamente, hasta llegar a un orden de magnitud de  $10^{-2}$ . Para **3-7(b)** sucede de igual forma, en  $D = 0$  la tasa tiene un valor constante para todo el rango de temperaturas. Al incrementar el acoplamiento la tasa decrece lentamente, tal como pasó en la figura **3-7(a)**, manteniendo su forma. Considerando

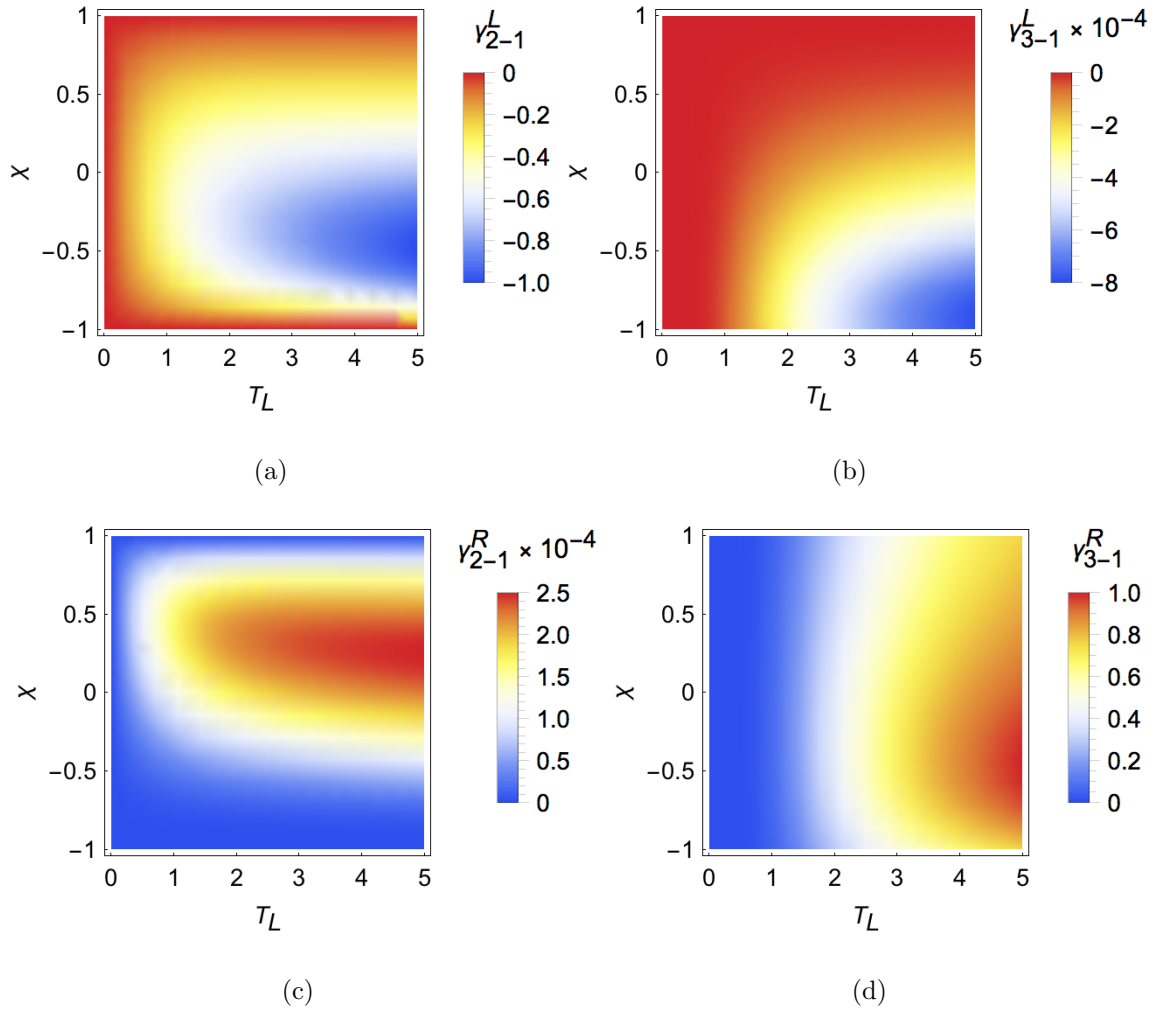
los gráficos **3-6** y **3-7** y su crecimiento/decrecimiento constante, es inmediato que los niveles de energía se ven ocupados igualmente cuando el valor de  $D$  aumenta; eso quiere decir que este parámetro privilegia el transporte de energía entre niveles en todo el rango de temperatura de igual forma para todas las transiciones.

### Influencia de la anisotropía $\chi$ cuando $T_L > T_R$

Como se dijo anteriormente, la anisotropía  $\chi$  en el acoplamiento DM mide la disposición de un espín respecto a otro. Para  $\chi = -1$  los espines están totalmente anti-simétricos, para  $\chi = 1$  totalmente simétricos y para  $\chi = 0$  no hay ningún tipo de simetría. La figura **3-8** muestra el mapa de calor de las tasas de transición de probabilidad para ambos baños cuando se incrementa la temperatura del baño izquierdo y se varía la anisotropía. Aquí, la figura **3-8(a)** representa la tasa  $\gamma_{2-1}^L$ . Se observa que en  $\chi = 0$  el mapa coincide con la figura **3-2(a)**, donde la tasa incrementa con la temperatura. Se observa que la tasa es máxima cuando  $\chi = -0.5$ , indicando que la asimetría parcial privilegia las transiciones. En el caso que los espines estén dispuestos simétrica o anti-simétricamente, las tasas van a cero. Se concluye de la figura que la simetría o asimetría parcial resulta mejor para el flujo de energía. Para la tasa  $\gamma_{3-1}^L$  la figura **3-8(b)** muestra que el valor máximo se presenta para altas temperaturas cuando los qubits están totalmente anti-simétricos y se anula totalmente al ser simétricos. Cuando  $\chi = 0$ , el comportamiento de la tasa coincide con la figura **3-2(b)**, situación en la cual su magnitud incrementa lentamente con la temperatura. Esta tasa es cuatro órdenes de magnitud menor que la tasa  $\gamma_{2-1}^L$  en todo el intervalo de temperatura. La tasa  $\gamma_{4-3}^L$  tiene un comportamiento similar a  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$  a  $\gamma_{3-1}^L$ , esto se debe a que las tasas describen transiciones entre niveles con igual diferencia de energía con vectores de estado similares. La figura **3-8(c)** muestra el mapa para la tasa  $\gamma_{2-1}^R$ . En este caso el máximo se produce en la región de simetría parcial entre los qubits cuando la temperatura entre ellos es la máxima, pero se anula cuando son totalmente simétricos o anti-simétricos. El comportamiento de la tasa cuando  $\chi = 0$ , el gráfico corresponde a lo visto en **3-3(a)** donde el crecimiento es monótono y la tasa es máxima en el valor máximo de temperatura. La figura **3-8(d)** corresponde a la tasa  $\gamma_{3-1}^R$ . Aquí, la tasa es máxima para todos los valores de anisotropía en alta temperatura. Para bajas temperaturas la tasa se anula. Tal como sucedió en el baño izquierdo, las tasas  $\gamma_{4-3}^R$  y  $\gamma_{4-2}^R$  tienen un comportamiento similar al presentado en  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{3-1}^L$ , respectivamente.

Estando en el estado estacionario y dada la dependencia de las tasas con el operador densidad y además  $\dot{\rho} = \dot{\rho}_L + \dot{\rho}_R = 0$ , se esperaría que  $\gamma_{j-i}^L \approx -\gamma_{j-i}^R$  como puede verse en las figuras **3-8(a)** y **3-8(c)**, para las tasas  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{2-1}^R$ . En las tasas  $\gamma_{3-1}^L$  y  $\gamma_{3-1}^R$  no se cumple, ya que la figura **3-8(b)** muestra una supresión en la tasa cuando los qubits tienen algún tipo de simetría en todo el rango de temperatura, y en la figura **3-8(d)** la tasa tiene un crecimiento monótono en todo el rango de temperatura para cualquier valor de anisotropía. Este tipo de





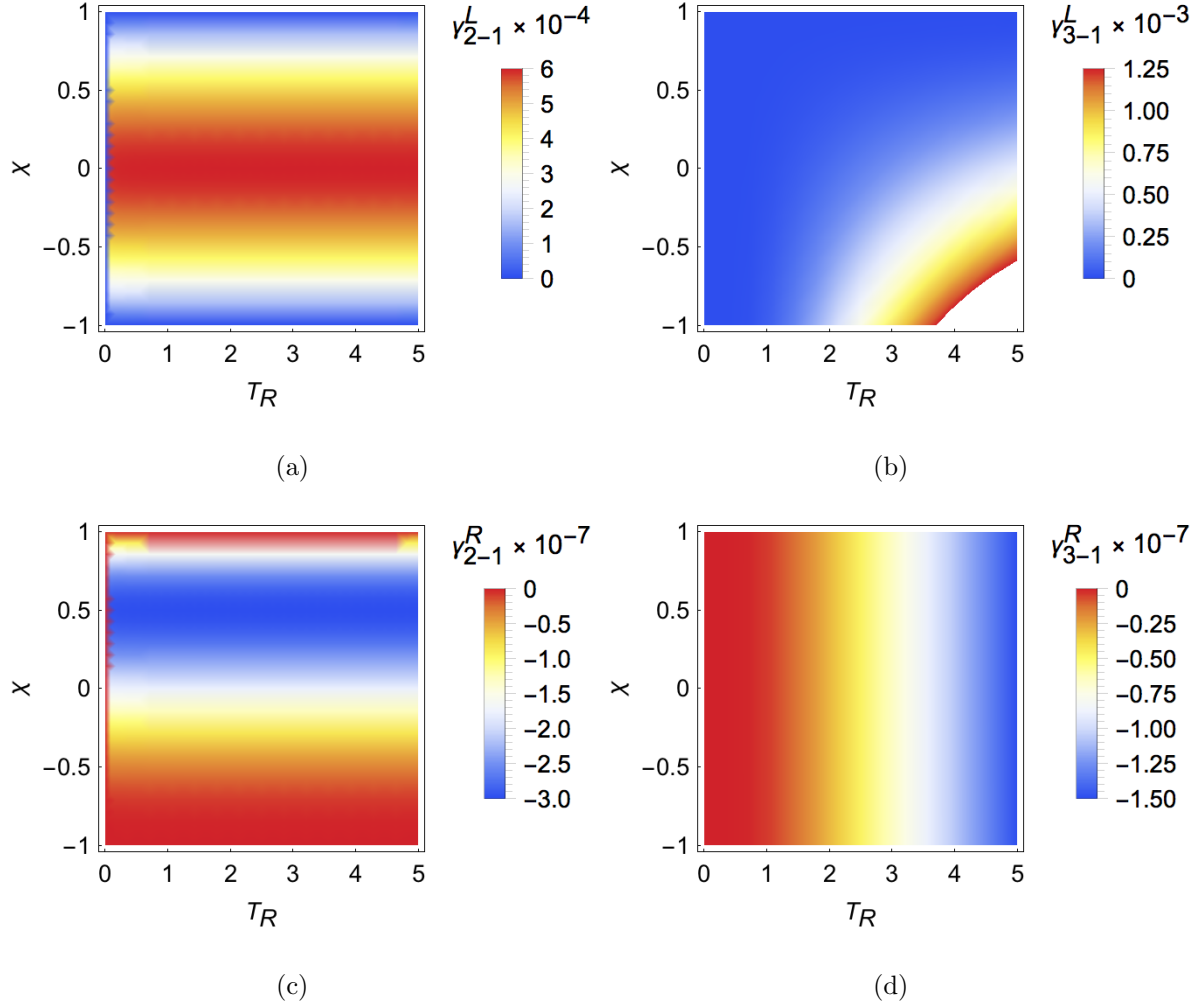
**Figura 3-8.:** Mapa de calor para las tasas de transición de probabilidad  $\Gamma_{2-1}^L$  y  $\Gamma_{3-1}^L$  cuando se incrementa la temperatura del baño izquierdo  $L$  y la anisotropía, con  $T_L > T_R$ . En la figura (a) se muestra la tasa de transición  $\Gamma_{2-1}^L$  y en la figura (b) muestra las tasas de transición  $\Gamma_{3-1}^L$ . En la figura (c) se muestra la tasa de transición  $\Gamma_{2-1}^R$  y en la figura (d) muestra las tasas de transición  $\Gamma_{3-1}^R$ . En el mapa, el código de colores indica que el color azul es el mínimo y el rojo el máximo valor. Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ .

comportamientos son los que se buscan en los sistemas estudiados, ya que en la región de supresión podría presentarse alta rectificación.

### Influencia de la anisotropía si $T_L < T_R$

El análisis de las tasas en este caso, indica el comportamiento de las tasas cuando las temperaturas se invierten. La figura 3-9 muestra el mapa de las tasas de transición de probabilidad para ambos baños cuando se incrementa la temperatura del baño derecho, quién será el de

mayor temperatura y se varía la anisotropía. La figura 3-9(a) muestra el mapa de la tasa



**Figura 3-9.:** Mapa de las tasas de transición de probabilidad  $\Gamma_{2-1}^L$  y  $\Gamma_{3-1}^L$  cuando se incrementa la temperatura del baño derecho  $R$  y la anisotropía, con  $T_L > T_R$ . En la figura (a) se muestra la tasa de transición  $\Gamma_{2-1}^L$  y en la figura (b) muestra las tasas de transición  $\Gamma_{3-1}^L$ . En la figura (c) se muestra la tasa de transición  $\Gamma_{2-1}^R$  y en la figura (d) muestra las tasas de transición  $\Gamma_{3-1}^R$ . En el mapa, el código de colores indica que el color azul es el mínimo y el rojo el máximo valor. Condiciones  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_L = 10^{-3}$ .

$\gamma_{2-1}^L$ . Se observa que la tasa tiene un valor constante en todo el rango de temperatura, al variar la anisotropía, el máximo valor se presenta cuando  $\chi = 0$  y se anulan cuando los qubits son totalmente simétricos o anti-simétricos. La tasa  $\gamma_{3-1}^L$  se muestra en el gráfico 3-9(b). El mapa indica que la tasa es máxima para alta temperatura en el caso que los qubits sean anti-simétricos, y se anula cuando son totalmente simétricos. Ambos gráficos coinciden con los presentados es 3-4(a) y 3-4(b) con  $\chi = 0$ . Las demás tasas  $\gamma_{4-3}^L$  y  $\gamma_{4-2}^L$ , cómo sucedió en  $T_L > T_R$  tiene un comportamiento igual dada la similitud de sus vectores de estado en la

ecuación 3-5. La figura 3-9(c) muestra la tasa  $\gamma_{2-1}^R$ , que tiene un valor constante en todo el rango de temperaturas, sin importar el valor de la asimetría, pero es claro que la tasa tendrá una magnitud mayor cuando los espines poseen algún tipo de simetría; en contraste, la tasa  $\gamma_{3-1}^R$  en la figura 3-9(d) tiene un crecimiento monótono en todo el rango de la anisotropía, mientras que es constante para cada valor de temperatura. Comparando 3-9(a) y 3-9(c), tienen comportamientos similares en el rango de temperatura debido a que ambas tienen vectores de estado similares y una diferencia de 4 órdenes en sus magnitudes; adicionalmente, la tasa  $\gamma_{2-1}^R$  se suprime en el rango de asimetría ( $-1 < \chi < 0$ ), y como se dijo en la sección anterior, se esperaría que una de las tasas sea la imagen especular de la otra. Esto también sucede para 3-9(b) y 3-9(d). También es importante anotar que la magnitud constante en las tasas  $\gamma_{2-1}^L$  y  $\gamma_{2-1}^R$ , en todo el rango de temperatura también implica una supresión en el flujo de energía, ya que un aumento en la temperatura, supone un incremento en el flujo.

### 3.2.3. Corriente y Rectificación

En este caso se tiene una configuración donde el subsistema es compuesto por dos qubits acoplados, a cada qubit se encuentra acoplado un baño. Cada baño solo interactúa con el qubit al cual se encuentra acoplado, como se ve en la figura 3-10. Para este sistema se usó una definición de rectificación tomada de las referencias [57, 22, 43] y es ligeramente distinta a la usada en el capítulo 2, en la cual la rectificación también da información acerca de la dirección de flujo.

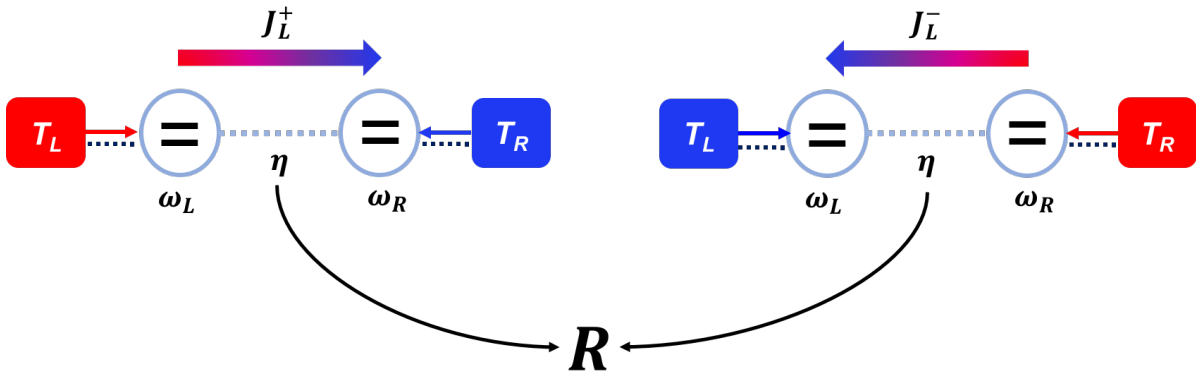
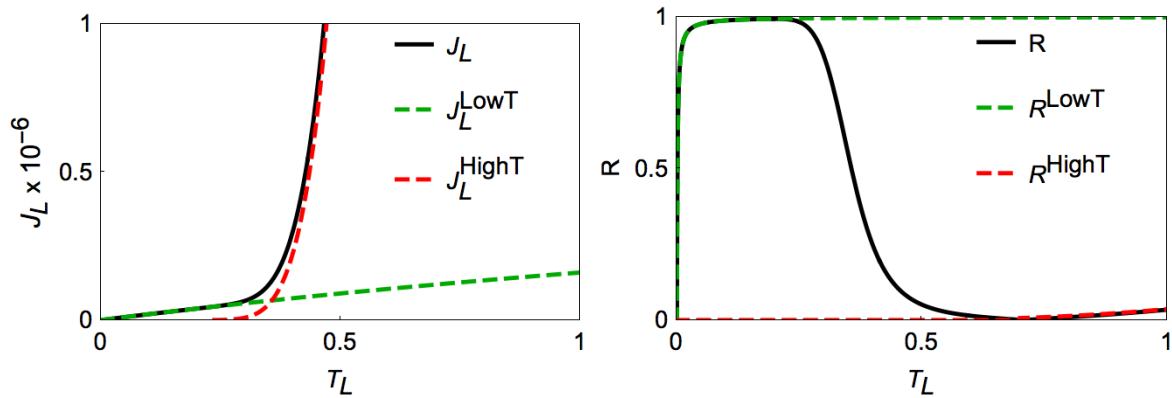


Figura 3-10.: Diagrama esquemático de la rectificación en la configuración de dos qubit y dos reservorios

$$R = \left| \frac{|J_L^+| - |J_L^-|}{\text{Max}(|J_L^+|, |J_L^-|)} \right| \quad (3-18)$$

Aquí,  $J_L^+$  es la corriente en dirección positiva, de la terminal  $L$  a  $R$  y  $J_L^-$  es la corriente en dirección negativa, de  $R$  a  $L$ . Si  $R = 0$ , no hay rectificación y si  $R = 1$ , significa que el flujo de energía fluye en una sola dirección. En las figuras 3-2, 3-3, 3-4 y 3-5, se hizo evidente que

el comportamiento de las tasas puede ser dividido en dos regiones: Alta y baja temperatura. Dado que la corriente y tasas tienen una relación directa, es correcto suponer que la corriente también exhibirá este comportamiento. En la figura 3-11 se graficó la corriente y rectificación a medida que se incrementa la temperatura del baño izquierdo. A partir de 3-11 y el análisis de las poblaciones, fue posible derivar expresiones analíticas para la corriente a partir de la ecuación 3-16. La figura 3-11(a) muestra la corriente calculada numéricamente versus



**Figura 3-11.:** Grafico de corriente y rectificación para el cálculo exacto versus las aproximaciones para baja y alta temperatura. La rectificación tiene su punto máximo en el intervalo de baja temperatura. La figura (a) muestra el ajuste para la corriente calculada de manera exacta y las calculadas analíticamente mediante las aproximaciones. La figura (b) muestra el ajuste de las aproximaciones para alta y baja temperatura en la rectificación. Condiciones:  $\omega_L = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ .

las aproximaciones de alta (curva roja) y baja (curva verde) temperatura, y su expresión se encuentra calculada en la siguiente sección. Se observa que la curva calculada numéricamente tiene un crecimiento lento y luego aumenta rápidamente. Este punto de inflexión representa el límite entre ambos comportamientos y se presenta en la temperatura de corte, la cual fue definida en la ecuación 3-17. Para la rectificación, en el gráfico 3-11(b) también se hacen evidentes los regímenes presenciados en las tasas de transición. Se identifica un intervalo a baja temperatura donde la rectificación llega a su máximo valor, la curva negra representa el comportamiento exacto y la curva verde representa la aproximación para este régimen. Después del punto de inflexión, la rectificación decrece hasta llegar a cero, esto significa un cambio de dirección en la corriente controlado por la temperatura del baño izquierdo. En el siguiente intervalo la rectificación no alcanza su valor máximo, la curva roja muestra la aproximación realizada para altas temperaturas. A continuación, se encuentran las expresiones para cada uno de los regímenes y se analizan la corriente y rectificación en ambos casos.

### Régimen de Baja Temperatura:

Como se dijo anteriormente, en el régimen de baja temperatura la transición  $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$  domina el transporte de energía. Teniendo en cuenta esto, en la ecuación 3-16 las demás transiciones se desprecian y se tiene que la ecuación 3-16 queda

$$J_p = -\lambda_- \alpha_p \gamma_{2-1}^p. \quad (3-19)$$

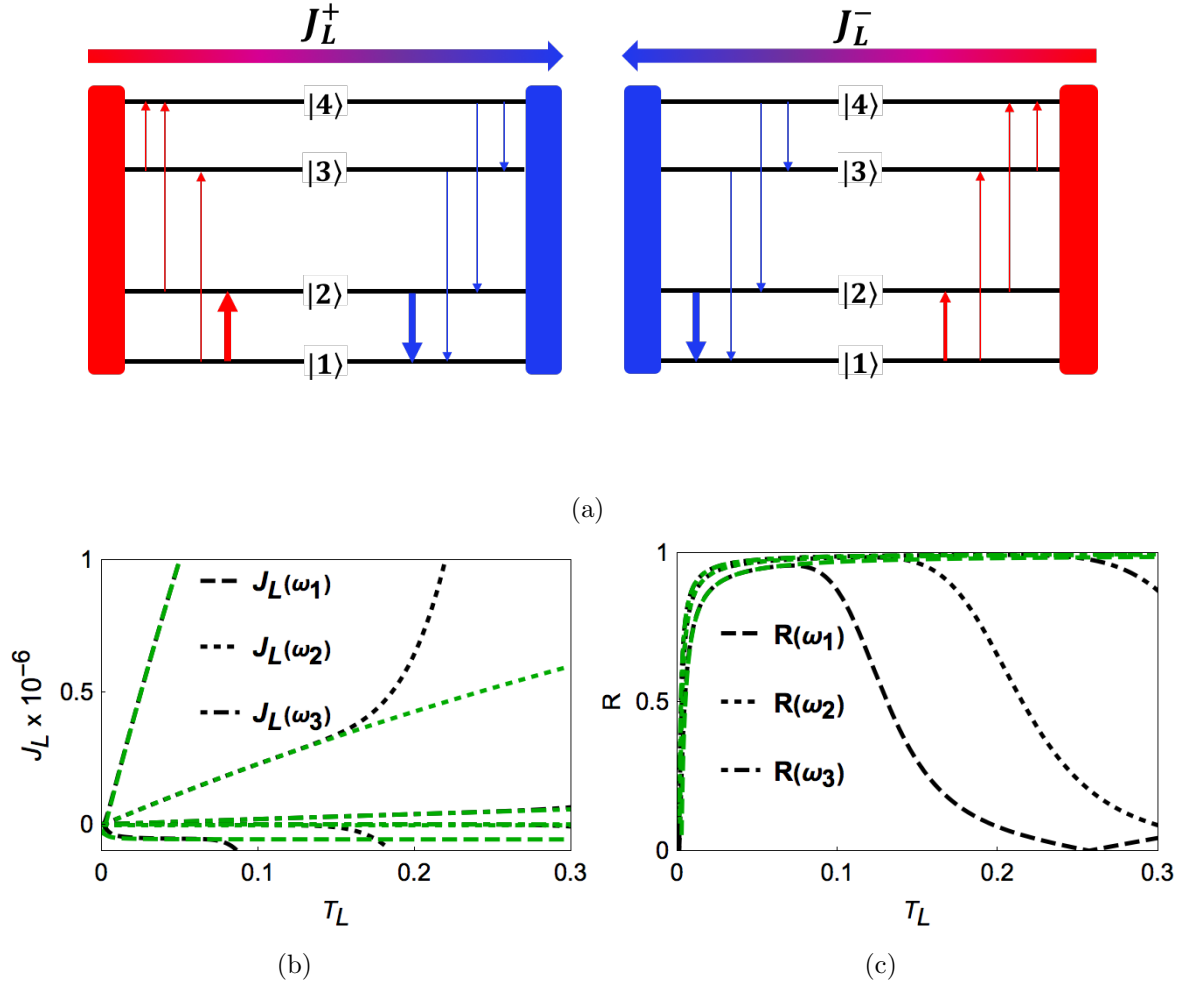
A partir de esta expresión y simplificando el coeficiente  $\alpha_p$  una expresión analítica para la corriente  $J_L$  a baja temperatura:

$$J_L^{LowT} = \frac{\lambda_-^2 \alpha_L \alpha_R}{(\alpha_L - \alpha_R) + (\alpha_L + \alpha_R) \frac{T_L \tanh\left(\frac{\lambda_-}{2T_R}\right) + \frac{\lambda_-}{2}}{T_L \tanh\left(\frac{\lambda_-}{2T_R}\right) - \frac{\lambda_-}{2}} \quad (3-20)$$

Esta aproximación es válida para la temperatura de corte expresada en la ecuación 3-17. Usando la ecuación 3-20 en la expresión 3-18 para la rectificación, se obtiene la expresión para la rectificación  $R$  en este mismo régimen, suponiendo que  $J_L^+ > J_L^-$ :

$$R^{LowT} = \frac{2(\alpha_L + \alpha_R)}{(\alpha_L - \alpha_R) + (\alpha_L + \alpha_R) \frac{T_L \tanh\left(\frac{\lambda_-}{2T_R}\right) + \frac{\lambda_-}{2}}{T_L \tanh\left(\frac{\lambda_-}{2T_R}\right) - \frac{\lambda_-}{2}} \quad (3-21)$$

La rectificación en este régimen es máxima, como se observó en la figura **3-11**, y se produce gracias al flujo neto de corriente que se genera en una dirección específica, esto implica que las tasas de transición de probabilidad serán mucho mayores en esa dirección. Para entender mejor esto, la figura **3-12** ilustra un diagrama esquemático de las tasas de transición de probabilidad y el comportamiento de la corriente en el intervalo de baja temperatura. Aquí, la figura **3-12(a)** muestra el diagrama de niveles para el caso de baja temperatura donde hay alta rectificación y la figura **3-12(b)** representa la corriente y se muestra el ajuste de la aproximación de baja temperatura con la corriente encontrada de forma exacta. El calibre de las flechas indica la magnitud de la transición, indicando de forma cualitativa el orden de magnitud de las tasas. Para  $J_L^+$  en **3-12(b)**, la tasa de transición entre  $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$  es proporcional en ambos reservorios, así, la corriente aumenta cuando incrementa  $T_L$ . Para  $J_L^-$  de nuevo la transición  $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$  es la de mayor orden en ambos baños, pero en este caso  $\gamma_{2-1}^L > \gamma_{2-1}^R$  e inclusive  $\gamma_{2-1}^R$  es una función constante en todo el rango de temperatura, como puede corroborarse en la figura **3-5**. Este comportamiento inusual en la corriente muestra que en esta configuración también se presenta NDTC, ya que al aumentar la diferencia de temperatura en los reservorios, la corriente no aumenta como lo predice la termodinámica, si no se mantiene constante o disminuye. Como se ha dicho en diversas



**Figura 3-12.:** Rectificación y corriente  $J_L^+$  y  $J_L^-$  en el régimen de baja temperatura. La figura (a) muestra un diagrama esquemático del comportamiento de las tasas de transición de probabilidad en este régimen, mientras que la figura (b), muestra la corriente  $J_L^+$  y  $J_L^-$  calculadas de forma exacta (curvas de color negro) y las calculadas usando la aproximación de baja temperatura (curvas de color verde) para diferentes valores de  $\omega_L$ . Condiciones:  $T_R = 10^{-3}$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\omega_1 = 1.0$ ,  $\omega_2 = 1.0$ ,  $\omega_3 = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$  y  $\eta = 0.07$ .

ocasiones, este comportamiento es deseable cuando se trata de dispositivos térmicos y es una de las condiciones necesarias para ser buen candidato a diodo térmico. Para la rectificación en la figura 3-12(c), se observa que  $R$  alcanza un valor máximo en casi todo el intervalo. Esto se debe a la diferencia que existe entre  $J_L^+$  y  $J_L^-$ , siendo la más alta para  $\omega_3$ , a pesar que las corrientes aquí, son las de menor magnitud para las tres frecuencias, como se observa en 3-12(b). Adicionalmente, es importante anotar que  $J_L^+ > J_L^-$ , por lo tanto el flujo neto de energía va del reservorio  $L$  a  $R$  cuando se alcanza el valor máximo de rectificación, como se observó en la figura 3-11(a).

### Régimen de Alta Temperatura

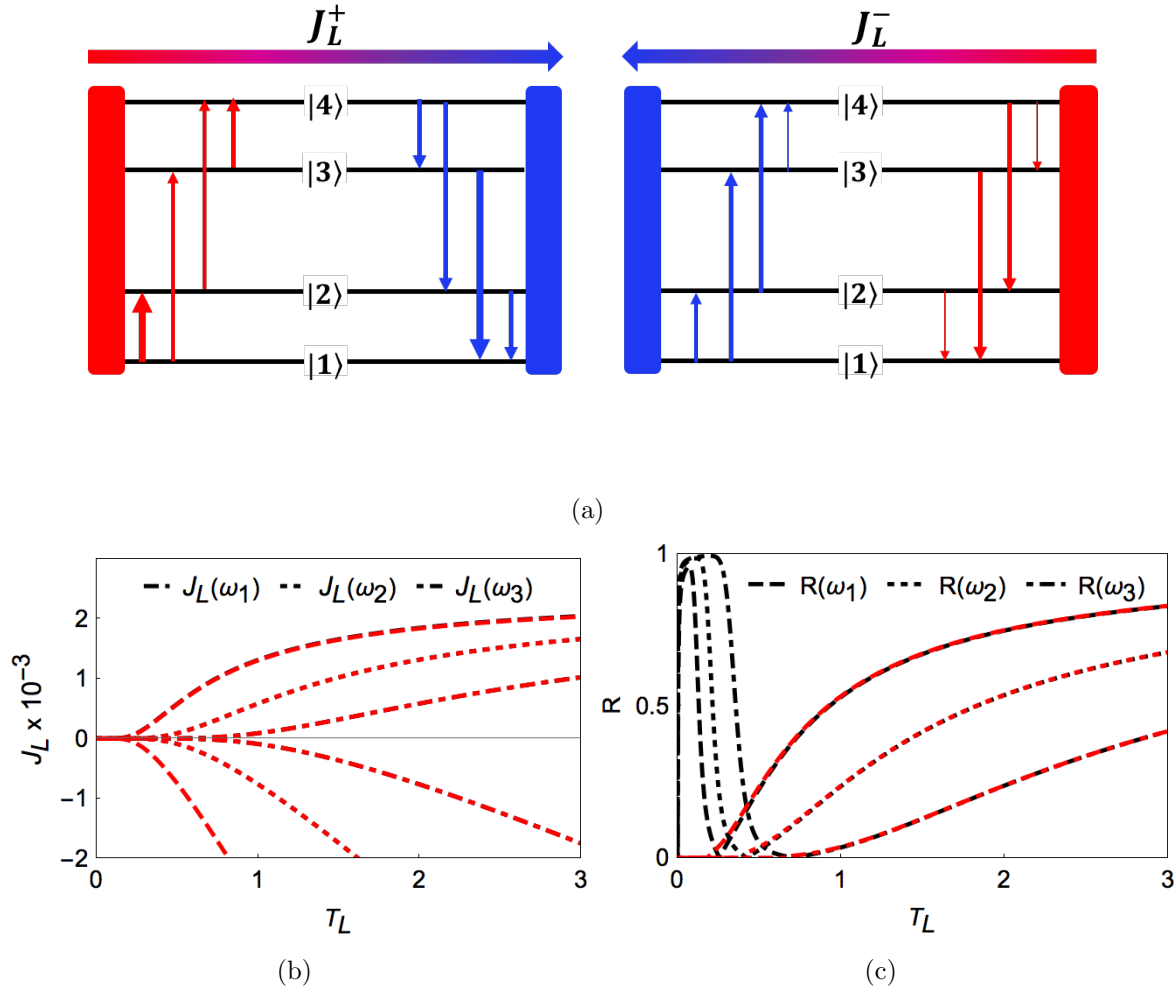
En el régimen de alta temperatura, todas las transiciones aportan en el flujo de energía del sistema. Considerando esto, a partir de las ecuaciones 3-16 y 3-18 se obtienen expresiones analíticas para la corriente y la rectificación en este régimen, suponiendo que  $J^+ < J^-$ .

$$J_L^{HighT} = \frac{-\alpha_L \lambda_-^2 \left( 1 + e^{-\frac{\zeta+\xi}{2T_L}} \operatorname{csch} \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} \right) + \gamma_R \left( 1 + e^{-\frac{\lambda_+}{2T_R}} \operatorname{csch} \left( \frac{\lambda_+}{2T_R} \right) \right) \right) - \gamma_R \lambda_+^2 \frac{\sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} - \frac{\lambda_+}{2T_R} \right)}{\sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} \right) \sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_R} \right)}}{2 \left( 1 + e^{-\frac{\lambda_+}{2T_L}} \operatorname{csch} \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} \right) + \gamma_R e^{-\frac{\lambda_+}{2T_R}} \operatorname{csch} \left( \frac{\lambda_+}{2T_R} \right) \right)} \quad (3-22)$$

$$R^{HighT} = 1 - \frac{\left( \frac{2\gamma_R}{e^{\frac{\lambda_+}{T_L}} - 1} + \coth \left( \frac{\lambda_+}{2T_R} \right) \right) \left( \lambda_-^2 \alpha_L \left( \coth \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} \right) + \gamma_R \coth \left( \frac{\lambda_+}{2T_R} \right) \right) + \frac{\lambda_+^2 \gamma_R \sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} - \frac{\lambda_+}{2T_R} \right)}{\sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} \right) \sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_R} \right)} \right)}{\left( \coth \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} \right) + \frac{2\gamma_R}{e^{\frac{\lambda_+}{T_R}} - 1} \right) \left( \lambda_-^2 \alpha_L \left( \gamma_R \coth \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} \right) + \coth \left( \frac{\lambda_+}{2T_R} \right) \right) - \frac{\lambda_+^2 \gamma_R \sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} - \frac{\lambda_+}{2T_R} \right)}{\sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_L} \right) \sinh \left( \frac{\lambda_+}{2T_R} \right)} \right)} \quad (3-23)$$

De la ecuación 3-22 se puede ver que el flujo de energía en este caso depende de ambas transiciones, predominando las transiciones de energía  $\lambda_+$  al igual que la rectificación en la ecuación 3-23. A partir de estas ecuaciones, la figura 3-23 muestra un diagrama esquemático de las tasas de transición en ambos baños, también, el comportamiento para las corrientes en ambos sentidos  $J_L^+$  y  $J_L^-$ .

La figura **3-13** muestra un diagrama esquemático de las tasas de transición entre los niveles de energía en los baños y la corriente en ambos sentidos para este régimen. En este caso, figura **3-13(a)** muestra que todas las tasas transición para  $J_L^+$  tienen órdenes de magnitud similares, por lo tanto, todas son relevantes; de igual forma, en  $J_L^-$  también sus magnitudes son similares. La figura **3-13(b)** presenta la corriente en ambos sentidos cuando se incrementa la temperatura del baño izquierdo. Las corrientes tienen órdenes de magnitud similares, lo cual concuerda con el análisis hecho con las tasas. Otro factor para resaltar es que ambas corrientes incrementan su magnitud con la temperatura, esto implica que no se presenta NDTC, ya que la corrientes aumentan tal como se espera. Al no presentarse NDTC, el sistema estudiado no posee las características suficientes para ser un diodo térmico en este régimen, a pesar que puede presentar altos valores de rectificación. La alta rectificación en este régimen se presenta por la gran diferencia de temperaturas y no por la manipulación de las propiedades del sistema descrito. Por último, y teniendo en cuenta los resultados obtenidos para ambos regímenes, se muestra cómo afecta la interacción DM la corriente y rectificación en el sistema estudiado.

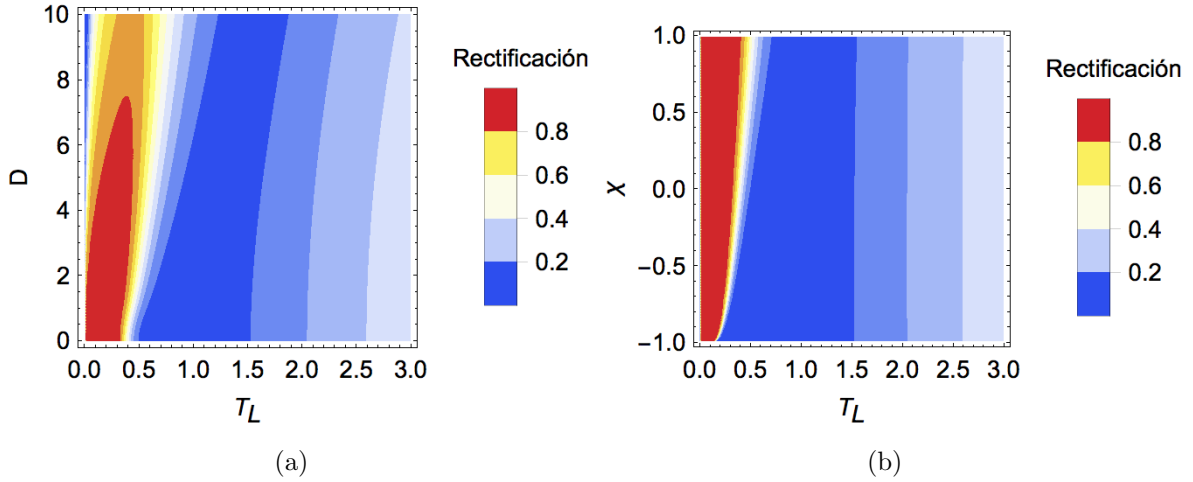


**Figura 3-13.:** Rectificación y corriente  $J_L^+$  y  $J_L^-$  en el régimen de baja temperatura. La figura (a) muestra un diagrama esquemático del comportamiento de las tasas de transición de probabilidad en este régimen, mientras que la figura (b), muestra la corriente  $J_L^+$  y  $J_L^-$  calculadas de forma exacta (curvas de color negro) y las calculadas usando la aproximación de alta temperatura (curvas de color rojo) para diferentes valores de  $T_L$ . Condiciones:  $T_R = 10^{-3}$ ,  $\chi = D = 0$ ,  $\omega_1 = 1.0$ ,  $\omega_2 = 1.0$ ,  $\omega_3 = 4.0$ ,  $\omega_R = 0$  y  $\eta = 0.07$ .

### Dependencia de la rectificación con la anisotropía $\chi$ , la fuerza de acoplamiento $D$ en función de $T_L$

En las secciones anteriores se estudió la dependencia de las tasas, corriente y rectificación con la temperatura del baños izquierdo. De las ecuaciones 3-21 y 3-23, es claro que la rectificación depende de los coeficientes de los estados vestidos provenientes de la orto-normalización. Estos coeficientes  $\alpha_p$ ,  $\gamma_p$  y la energía entre niveles no dependen de la temperatura, pero si de los parámetros que median la interacción DM. Por esta razón, se hace necesario analizar la influencia que estos tienen sobre la rectificación. La figura 3-14(a) muestra el mapa de



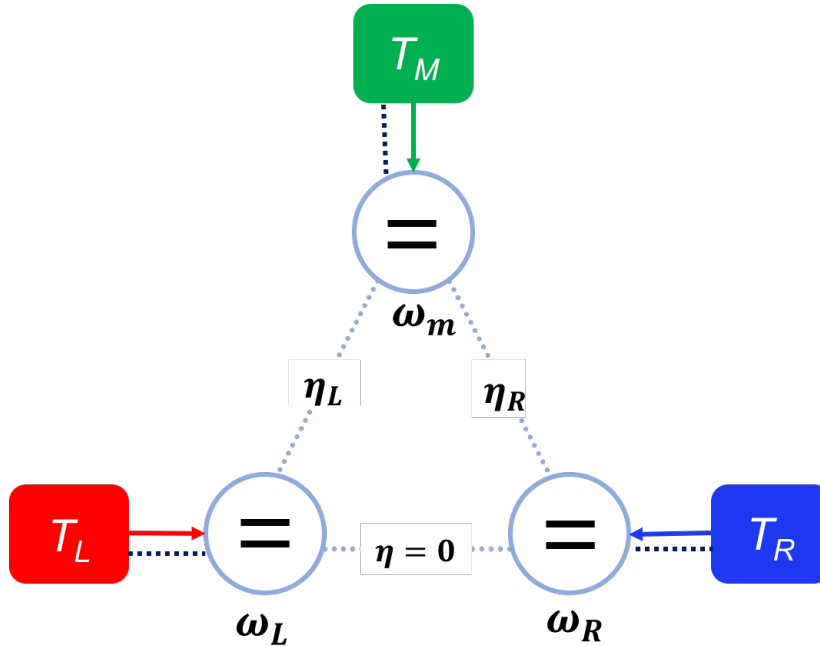


**Figura 3-14.:** Mapa de calor para la rectificación para  $D$  y  $\chi$  vs  $T_L$ . La figura (a) muestra el cambio de la rectificación cuando la fuerza de la interacción DM varía, con  $\chi = 0$ . La figura (b) muestra la rectificación cuando la anisotropía es modificada, con  $D = 0$ . Condiciones  $\omega_R = 0$ ,  $\eta = 0.07$  y  $T_R = 10^{-3}$ .

rectificación cuando se incrementa la fuerza de interacción DM entre los qubits. En el mapa de rectificación para  $D = 0$ , el gráfico coincide con la curva mostrada en la figura 3-11(a), donde el máximo de rectificación se encuentra en el régimen de baja temperatura, luego decrece hasta anularse y aumenta nuevamente en el régimen de alta temperatura, sin llegar a alcanzar el valor máximo de  $R$ . Cuando  $D$  aumenta su valor, se observa que la región de máxima rectificación se mantiene en el régimen de baja temperatura; también, se observa que la región azul, que se interpreta como cambio de dirección en el flujo neto se reduce. Esto sucede ya que la interacción DM actúa de forma similar al acoplamiento de los qubits, mientras mayor sea su interacción, mayor será la probabilidad de transición entre los niveles del sistema. Esto favorece la corriente en ambos sentidos, pero no la rectificación, ya que  $J_L^+$  será similar a  $J_L^-$ . Esto puede corroborarse observando el comportamiento de las tasas de transición en la figura 3-6 y 3-7 cuando se incrementa la fuerza de interacción DM. Ahora, la figura 3-14(b) muestra el mapa de rectificación cuando se orientan los espines de forma simétrica o anti-simétrica. Como se observa, la máxima rectificación se mantiene para el intervalo de baja temperatura, abarcando un intervalo ligeramente mayor cuando los qubits se encuentran arreglados de forma simétrica. Luego, al incrementar la temperatura la rectificación decrece hasta ser cero, esto también supone que ambas corrientes  $J_L^+$  y  $J_L^-$  son de magnitudes similares. Finalmente, en el régimen de alta temperatura la rectificación aumenta hasta un valor aproximado de 0.4. De ambos gráficos es notorio que los parámetros DM no cambian la forma de la rectificación, esto significa que se conserva el comportamiento del flujo de energía, y aunque  $D$  privilegie las transiciones, esto no implica una mayor rectificación.

### 3.3. El transistor térmico

En el transistor térmico se consideran tres qubits  $L$ ,  $R$ ,  $M$  acoplados entre sí. A la vez, cada qubit se encuentra acoplado a un reservorio térmico que no interactúa con los otros componentes del sistema, como muestra la figura 3-15. En este sistema, se propone una configuración tipo anillo como la reportada en [22], donde los qubits emulan los componentes de un transistor bipolar electrónico, el cual está conformado por una terminal llamada base ( $M$ ) que controla el flujo de corriente eléctrica entre dos terminales llamadas emisor ( $L$ ) y colector ( $R$ ). El Hamiltoniano total del sistema se escribe de igual forma que la ecuación



**Figura 3-15.:** Diagrama esquemático de un transistor térmico compuesto por tres qubits de frecuencia  $\omega_p$  que interactúan con una intensidad de acoplamiento  $\eta_p$ . Cada qubit está acoplado a un reservorio con diferente temperatura.

1-1, también se usa el mismo tipo de baños bosónicos y la interacción subsistema-baño es modelada por la interacción espín-bosón, de igual forma que en el diodo térmico. El Hamiltoniano de los qubits, se expande para  $L$ ,  $R$  y  $M$ :

$$H_s = \frac{\omega_M}{2}\sigma_z^M + \eta\chi(\sigma_M^+\sigma_L^+ + \sigma_M^+\sigma_R^+ + \sigma_M^-\sigma_L^- + \sigma_M^-\sigma_R^-) + \eta(1+iD)(\sigma_M^+\sigma_L^- + \sigma_M^+\sigma_R^-) + \eta(1-iD)(\sigma_M^-\sigma_L^+ + \sigma_M^-\sigma_R^+) \quad (3-24)$$

En este caso, se escogió  $\omega_R = \omega_L = 0$  para facilitar los cálculos analíticos siguiendo la situación especial estudiada en [22]. Los estados de cada qubit se escriben  $|e\rangle_p$  para el estado excitado y  $|g\rangle_p$  para el estado base. La base desacoplada es descrita por los vectores  $|LMR\rangle$ :

$|eee\rangle, |eeg\rangle, |ege\rangle, |egg\rangle, |gee\rangle, |geg\rangle, |gge\rangle$  y  $|ggg\rangle$ . Los auto-estados del sistema conjunto son encontrados mediante la diagonalización del Hamiltoniano, obteniendo un sistema de cuatro niveles cada uno con doble degeneración, para un total de ocho niveles. Los estados vestidos en términos de la base desacoplada y sus respectivas energías se presentan en orden ascendente, como sigue.

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= D_1^- \left( \frac{A_1^-}{\lambda_-} |eee\rangle + B_1^+ |egg\rangle + \frac{(1+iD)C_1^+}{\lambda_-} |geg\rangle + |gge\rangle \right), & \epsilon_1 = \omega_1 = -\xi, \\
|2\rangle &= D_2^- \left( -\frac{A_2^+}{\lambda_-} |eeg\rangle + \frac{B_2^+}{(1+iD)} |ege\rangle - \frac{C_2^+}{\lambda_-} |gee\rangle + |ggg\rangle \right), & \epsilon_2 = \epsilon_1 = \omega_1, \\
|3\rangle &= D_3^- \left( \frac{A_1^+}{\lambda_-} |eee\rangle + B_1^- |egg\rangle - \frac{C_1^- (1+iD)}{\lambda_-} |geg\rangle + |gge\rangle \right), & \epsilon_3 = \omega_2 = -\zeta, \\
|4\rangle &= D_4^- \left( \frac{A_2^-}{\lambda_-} |eeg\rangle + \frac{B_2^-}{(1+iD)} |ege\rangle + \frac{C_2^-}{\lambda_-} |gee\rangle + |ggg\rangle \right), & \epsilon_4 = \epsilon_3 = \omega_2, \\
|5\rangle &= D_3^+ \left( \frac{-A_1^+}{\Lambda_-} |eee\rangle + B_1^- |egg\rangle + \frac{C_1^- (1+iD)}{\Lambda_-} |geg\rangle + |gge\rangle \right), & \epsilon_5 = \omega_3 = \zeta, \\
|6\rangle &= D_4^+ \left( \frac{-A_2^-}{\Lambda_-} |eeg\rangle + \frac{B_2^-}{(1+iD)} |ege\rangle - \frac{C_2^-}{\Lambda_-} |gee\rangle + |ggg\rangle \right), & \epsilon_6 = \epsilon_5 = \omega_3, \\
|7\rangle &= D_1^+ \left( \frac{-A_1^-}{\Lambda_-} |eee\rangle + B_1^+ |egg\rangle - \frac{(1+iD)C_1^+}{\Lambda_-} |geg\rangle + |gge\rangle \right), & \epsilon_7 = \omega_4 = \xi, \\
|8\rangle &= D_2^+ \left( \frac{A_2^+}{\Lambda_-} |eeg\rangle + \frac{B_2^+}{(1+iD)} |ege\rangle + \frac{C_2^+}{\Lambda_-} |gee\rangle + |ggg\rangle \right), & \epsilon_8 = \epsilon_7 = \omega_4.
\end{aligned} \tag{3-25}$$

Aquí,  $\Lambda_{\pm} = \xi \pm \omega_M$  y  $\lambda_{\pm} = \zeta \pm \omega_M$ . Los coeficientes  $A_{\nu}^{\pm}$ ,  $B_{\nu}^{\pm}$ ,  $C_{\nu}^{\pm}$  y  $D_{\nu}^{\pm}$  con  $\nu = 1, 2, 3, 4$ , provienen de la ortonormalización de los estados vestidos y su expresión completa se muestra en el anexo C. Además,  $\omega_1 = -\xi$ ,  $\omega_2 = -\zeta$ ,  $\omega_3 = \zeta$  y  $\omega_4 = \xi$  son las energías de los niveles degenerados, con:

$$\xi = \frac{1}{2} \sqrt{2(D^2 + \chi^2 + 1)\eta_L^2 + 2(D^2 + \chi^2 + 1)\eta_R^2 + \omega_M^2 + 2\epsilon}, \tag{3-26}$$

$$\zeta = \frac{1}{2} \sqrt{2(D^2 + \chi^2 + 1)\eta_L^2 + 2(D^2 + \chi^2 + 1)\eta_R^2 + \omega_M^2 - 2\epsilon}. \tag{3-27}$$

Con  $\epsilon = \sqrt{(D^2 - \chi^2 + 1)^2 (\eta_L^4 + \eta_R^4) + 2(6(D^2 + 1)\chi^2 + (D^2 + 1)^2 + \chi^4) \eta_L^2 \eta_R^2}$ . Los estados vestidos para el transistor muestran cuáles son las transiciones permitidas, teniendo en cuenta que el Hamiltoniano de los reservorios descrito en la ecuación 1-54 solo permite una transición a la vez, las transiciones permitidas en este sistema total serán las producen las diferencias de energías  $\omega_{2-1} = \xi - \zeta$ ,  $\omega_{3-1} = \xi + \zeta$ ,  $\omega_{3-2} = 2\xi$  y  $\omega_{4-1} = 2\zeta$  en cada baño.

### 3.3.1. Dinámica asintótica

De igual forma que en el diodo, se parte desde la ecuación maestra en la forma de Lindblad expresada en 3-10. Nuevamente, al encontrarnos en el estado asintótico, la corriente se calcula a partir de la ecuación 3-13 y definidos los estados vestidos del sistema, es posible calcular los operadores  $A_p(\omega)$

$$\begin{aligned}
A_p(\omega) &= A_p(2\xi) + A_p(2\zeta) + A_p(\xi + \zeta) + A_p(\xi - \zeta) \\
&= a_p|1\rangle\langle 4| + b_p|2\rangle\langle 3| + c_p|5\rangle\langle 8| + d_p|6\rangle\langle 7| \\
&\quad + e_p|1\rangle\langle 6| + g_p|2\rangle\langle 5| + h_p|3\rangle\langle 8| + k_p|4\rangle\langle 7| \\
&\quad + m_p|3\rangle\langle 6| + m_p|4\rangle\langle 5| + t_p|1\rangle\langle 8| + v_p|2\rangle\langle 7|
\end{aligned} \tag{3-28}$$

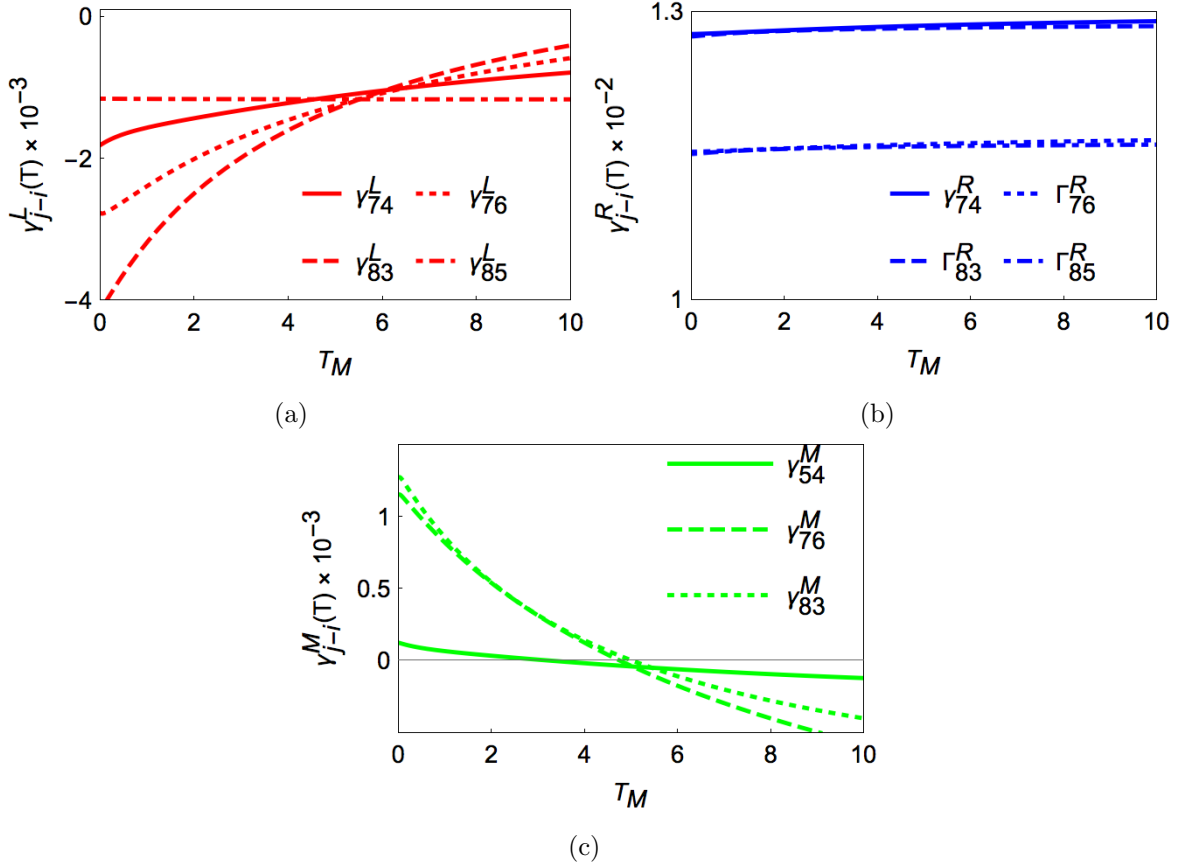
Nuevamente, los coeficientes dependen de la ortonormalización de los estados vestidos. Finalmente, se calcula el súper-operador de Lindblad para obtener la expresión de la corriente en el transistor térmico

$$\begin{aligned}
J_p &= -\omega_{2-1} (\alpha_p \gamma_{4-1}^p + \beta_p \gamma_{3-2}^p + \delta_p \gamma_{7-6}^p + \gamma_p \gamma_{8-5}^p) \\
&\quad - \omega_{3-1} (\theta_p \gamma_{6-1}^p + \iota_p \gamma_{5-2}^p + \kappa_p \gamma_{8-3}^p + \mu_p \gamma_{7-4}^p) \\
&\quad - \omega_{3-1} (\sigma_p \gamma_{6-3}^p + \tau_p \gamma_{5-4}^p) - \omega_{4-1} (v_p \gamma_{8-1}^p + \psi_p \gamma_{7-2}^p),
\end{aligned} \tag{3-29}$$

donde  $\gamma_{j-i}^p$  es la tasa de transición de probabilidad de  $|j\rangle$  a  $|i\rangle$ , y se define en la ecuación 3-11. Los coeficientes  $\alpha_p, \beta_p, \gamma_p, \delta_p, \gamma_p, \theta_p, \iota_p, \kappa_p, \mu_p, \sigma_p, \tau_p, v_p$  y  $\psi_p$  resultan de la proyección de los coeficientes del operador  $A_p(\omega)$  y su expresión completa se encuentra en las ecuaciones C-2, C-3 y C-4 el anexo C. Estos coeficientes contienen la dependencia de la dinámica del sistema con el acoplamiento DM, pero no dependen de la temperatura. Es claro a partir de la ecuación 3-29, que la corriente depende explícitamente del cambio que se produce en las tasas de transición de probabilidad. Debido a esto, entender el comportamiento de estas tasas de transición facilita comprender el comportamiento de la corriente.

### 3.3.2. Tasas de Transición de Probabilidad

Para facilitar la comprensión, se calcularon los coeficientes que acompañan cada tasa, así, solo se analizarán las tasas que contribuyen en la corriente. En todos los gráficos presentados a continuación se tomó  $\chi = D = 0$  y  $\eta_L = \eta_R$ . Las transiciones permitidas en los baños  $L$  y  $R$  son  $|7\rangle \leftrightarrow |4\rangle$ ,  $|7\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ ,  $|8\rangle \leftrightarrow |3\rangle$  y  $|8\rangle \leftrightarrow |5\rangle$ . Finalmente, para el baño  $M$  son  $|5\rangle \leftrightarrow |4\rangle$ ,  $|7\rangle \leftrightarrow |6\rangle$  y  $|8\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ . Es importante aclarar que estos coeficientes son cero para las condiciones específicas dadas, eso implica que al tomar otros valores para las variables del sistema es posible que algunas ya no sean cero y dicha transición en específico sea relevante. La figura 3-16(a) muestra la tasa de transición de probabilidad para el baño  $L$ , las demás transiciones permitidas no aportan a la corriente en este baño, por tal razón,



**Figura 3-16.:** Tasas de transición de probabilidad en cada baño cuando se incrementa la temperatura del baño  $M$ . La figura (a) muestra las tasas de transición de probabilidad  $\Gamma_{7-6}^L$ ,  $\Gamma_{8-3}^L$ ,  $\Gamma_{8-5}^L$ . Condiciones  $\omega_M = 10^{-2}$ ,  $\eta_L = \eta_R = 0.07$ ,  $T_R = 10^{-2}$  y  $T_L = 10$ .

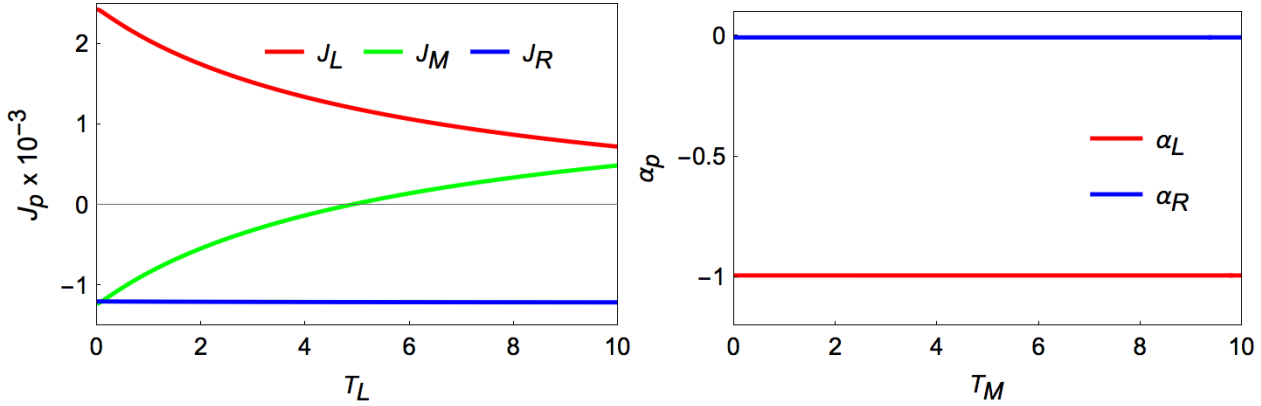
no se muestran. Se observa del gráfico que las tasas son negativas, lo cual indica que en el baño, las transiciones ocurren desde el nivel inferior al superior, también, las tasas  $\Gamma_{7-4}^L$ ,  $\Gamma_{7-6}^L$  y  $\Gamma_{8-3}^L$  decrecen a medida que se incrementa la temperatura del baño  $M$ , mientras la tasa  $\Gamma_{8-5}^L$  se mantiene constante. La figura 3-16(b) muestra las tasas para el baño  $R$ , las cuales incrementan lentamente en todo el intervalo de temperatura. Se observa también que las tasas  $\Gamma_{7-4}^R = \Gamma_{8-3}^R$  y  $\Gamma_{7-6}^R = \Gamma_{8-5}^R$ , lo cual se debe a la degeneración que existe en los niveles, ya que  $|7\rangle$  y  $|8\rangle$  pertenecen la misma energía, de igual forma que  $|3\rangle$  y  $|4\rangle$ . Para el baño  $M$ , la figura 3-16(c) muestra que las tasas tienen un decrecimiento monótono, mostrando un flujo de energía hacia niveles superiores, cada vez menor y se anula, para luego fluir en dirección contraria. El análisis conjunto de las tasas muestra cambios en los baños  $L$  y  $M$ , mientras que el baño  $R$  se mantiene constante. Esto indica que bajo esta condición, el sistema no exhibiría efecto transistor.

### 3.3.3. Corriente y Amplificación térmica

Cómo se dijo en la sección anterior, en las condiciones específicas que se calcularon las tasas, todas las transiciones no aportan a la corriente, por lo tanto la ecuación 3-29 en cada baño se reduce a lo siguiente.

$$\begin{aligned}
 J_L &= -\omega_{2-1} (\delta_L \Gamma_{7-6}^L + \gamma_L \Gamma_{8-5}^L) - \omega_{3-1} (\kappa_L \Gamma_{8-3}^L + \mu_L \Gamma_{7-4}^L) \\
 J_R &= -\omega_{2-1} (\delta_R \Gamma_{7-6}^R + \gamma_R \Gamma_{8-5}^R) - \omega_{3-1} (\kappa_R \Gamma_{8-3}^R + \mu_R \Gamma_{7-4}^R) \\
 J_M &= -\omega_{2-1} \delta_M \Gamma_{7-6}^M - \omega_{3-1} \kappa_M \Gamma_{8-3}^M - \omega_{3-1} \tau_M \Gamma_{5-4}^M
 \end{aligned} \tag{3-30}$$

La ecuación anterior sugiere que las corrientes en los baños  $L$  y  $R$ , están controladas por las mismas transiciones. Para  $J_M$  la situación es distinta, las transiciones que controlan el flujo son diferentes a las de  $L$  y  $R$ . La figura 3-17, muestra el cambio de las corrientes y la amplificación térmica mientras se incrementa la temperatura del baño  $M$ . En la figura 3-



**Figura 3-17.:** Corriente y amplificación térmica incrementa la temperatura del baño  $M$ . Condiciones  $\omega_M = 10^{-2}$ ,  $\eta_L = \eta_R = 0.07$ ,  $T_R = 10^{-2}$  y  $T_L = 10$ .

17(a) cómo es de esperarse después de analizar la tasas, la corriente  $J_L$  incrementaría su valor a medida que incrementa la temperatura del baño. El baño  $M$  tiene una forma similar, pero en este caso, la corriente decrece hasta llegar a ser cero y cambia de signo, lo que significa un cambio de dirección en el flujo. En cuanto al baño  $R$ , se observa que se mantiene constante en todo el rango de temperatura, esto se explica gracias al comportamiento constante que se evidenció en sus tasas de transición en la figura 3-16. La figura 3-17(b) muestra el coeficiente de amplificación térmica calculado con la ecuación 1-60 en ambos baños. Se observa que la corriente del baño  $R$  no se amplifica, resultado esperado debido a que  $J_R$  es constante en todo el intervalo de temperatura. Para el baño  $L$ , el crecimiento de la corriente es proporcional al de  $M$ , dado que  $\alpha^L = -1$ . El análisis conjunto de las corrientes y la amplificación permite concluir que en este caso específico no se genera efecto transistor. El efecto transistor podría encontrarse en otro rango de temperaturas, o buscando una condición

diferente en los parámetros DM. Otra opción, por ejemplo, considerar las frecuencias de los qubits  $L$  y  $R$  distintas de cero. También, es posible asimetrizar el acoplamiento entre los qubits y otra que no ha sido considerada en la literatura, que es asimetrizar las densidades espectrales de cada reservorio.

### 3.4. Conclusiones y perspectivas

En este capítulo se resolvió la ecuación maestra en la forma de Lindblad para calcular el transporte de energía en un sistema de dos qubits acoplados cada uno a reservorios térmicos que no interactúan. Se estudió cómo la temperatura afecta este tipo de sistemas, encontrando que el sistema puede dividirse en dos regiones en las cuales la rectificación tiene un comportamiento distinto. El primer intervalo es de baja temperatura con una temperatura de corte  $T_L < (\omega_L + \omega_{2-1})/(\ln(1 + \frac{1}{\epsilon}))$ . En este intervalo, la rectificación es casi del 100 % debido a que la corriente  $J_L^-$  es suprimida, presentándose NDTC. Luego, en el intervalo de alta temperatura en condiciones específicas puede llegar hasta el 80 %, pero ésta se debe a la gran asimetría en la temperatura de los baños. También, fueron encontradas expresiones analíticas para ambos intervalos, las cuales se ajustan a las curvas calculadas numéricamente. Dado que el intervalo de baja temperatura muestra condiciones específicas para la constitución de un diodo térmico, se examinó sistemáticamente la influencia de la anisotropía y la intensidad del acoplamiento DM en este régimen. Se observó que el acoplamiento DM funciona de forma similar al acoplamiento entre los qubits, favoreciendo la probabilidad de transición entre niveles que tienen baja ocupación, por lo cual, tener una fuerza de acoplamiento DM muy grande no favorece la rectificación. En cuanto a la anisotropía también se observó que no afecta de gran manera la rectificación. Comparando esta configuración con la vista en el capítulo 2, se encontró para las configuraciones expuestas que el campo magnético externo modifica el comportamiento de los reservorios sin alterar su estructura, manteniendo el sistema central fijo. En ese caso no sería posible por ejemplo diseñar un motor térmico. En cambio, en este capítulo el campo externo aparece implícitamente en el Hamiltoniano de DM, ya que la energía del sistema de dos niveles se refiere a un campo Zeeman aplicado. Pero el interés de esta tesis estuvo centrado en el transporte de calor, este valor se fijó y en este caso, si se podría diseñar un ciclo termodinámico incluyendo calor y trabajo. El análogo a un motor térmico en el capítulo 2 resultaría de estudiar la dinámica transitoria y no sólo los estados estacionarios.

Como perspectiva, queda la inquietud de avanzar a sistemas reales. Los resultados de los capítulos 2 y 3 muestran que hay efectos interesantes que deben buscarse en sistemas reales de acuerdo a los regímenes de parámetros predichos, i.e si hay sistemas reales que estén en esos regímenes. Y siguiendo la línea de dispositivos termotrónicos, el siguiente paso en esta investigación debe enfocarse en el uso de este sistema para el modelamiento de compuertas

lógicas, dado que el sistema presenta NDTC y este es un comportamiento deseable en este tipo de dispositivos.



# A. Anexo: Autoenergías

- El hamiltoniano total se expresa como:

$$H_T = h\sigma_z^c + \sum_{k,\alpha} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \sum_{l,\beta} \epsilon_{l\beta} d_{l\beta}^\dagger d_{l\beta} + V_L \cdot \sigma_c + V_R \cdot \sigma_c \quad (\text{A-1})$$

Aquí,  $c_{k\alpha}^\dagger$  ( $c_{k\alpha}$ ) and  $d_{l\beta}^\dagger$  ( $d_{l\beta}$ ) son los operadores de creación (aniquilación) para los baños de la izquierda y derecha, respectivamente.  $V_L \cdot \sigma_c$  and  $V_R \cdot \sigma_c$  es el hamiltoniano de interacción entre los baños y sistema central. Este acoplamiento se expresa:

$$\mathbf{V}_L = \lambda_L \sum_{k,p,\alpha,\beta} c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} c_{p\beta} \quad (\text{A-2})$$

$$\mathbf{V}_R = \lambda_R \sum_{l,m,\alpha,\beta} c_{l\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} c_{m\beta} \quad (\text{A-3})$$

con esto, el operador  $V$  para cada baño se expresa como:

$$\begin{array}{cc} \text{L} & \text{R} \\ V_x & \lambda_L \sum_{k,k'} (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow}) \quad \lambda_R \sum_{l,l'} (d_{l\uparrow}^\dagger d_{l'\downarrow} + d_{l\downarrow}^\dagger d_{l'\uparrow}) \\ V_y & i\lambda_L \sum_{k,k'} (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow}) \quad i\lambda_R \sum_{l,l'} (d_{l\uparrow}^\dagger d_{l'\downarrow} - d_{l\downarrow}^\dagger d_{l'\uparrow}) \\ V_z & \lambda_L \sum_{k,k'} (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow}) \quad i\lambda_R \sum_{l,l'} (d_{l\uparrow}^\dagger d_{l'\uparrow} - d_{l\downarrow}^\dagger d_{l'\downarrow}) \end{array}$$

La ecuación maestra para este caso está dada en el espacio de Laplace como:

$$zM_\beta(z) - \sum_{\alpha} h_{\beta\alpha} M_\alpha(z) - \sum_{\alpha} \Sigma_{\beta\alpha} M_\alpha(z) = \langle \sigma_\beta \rangle_0 \quad (\text{A-4})$$

esta ecuación puede escribirse como un sistema de ecuaciones lineales  $A(z)M(z) = B$ :

$$\left( \begin{array}{c|c|c|c} z & 0 & 0 & 0 \\ \Sigma_{x0} & z - \Sigma_{xx} & 2ih - \Sigma_{xy} & -h_{xz} - \Sigma_{xz} \\ \Sigma_{y0} & -h_{yx} - \Sigma_{yx} & z - \Sigma_{yy} & -h_{yz} - \Sigma_{yz} \\ \Sigma_{z0} & -h_{zx} - \Sigma_{zx} & -h_{zy} - \Sigma_{zy} & z - \Sigma_{zz} \end{array} \right) \begin{pmatrix} M_0(z) \\ M_x(z) \\ M_y(z) \\ M_z(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \sigma_0 \rangle_0 \\ \langle \sigma_x \rangle_0 \\ \langle \sigma_y \rangle_0 \\ \langle \sigma_z \rangle_0 \end{pmatrix}$$

En esta ecuación, el campo  $h_{\beta\alpha}$  y las autoenergías  $\Sigma_{\beta\alpha}$  se definen como:

$$h_{\beta\alpha} = \frac{1}{2} \text{Tr} (\sigma_\beta [H_s + \langle H_I \rangle, \sigma_\alpha]) \quad (\text{A-5})$$

Para  $\alpha = 0$ :

$$\Sigma_{\beta 0} = 2 \int_0^\infty dt e^{izt} \sum_{\gamma, \delta} (1 - \delta_{\beta\gamma}) \text{Im} \langle \tilde{V}_\gamma(t) \tilde{V}_\delta \rangle \text{Tr} (\sigma_\beta \sigma_\gamma e^{ith\sigma_z} \sigma_\delta e^{-ith\sigma_z}) \quad (\text{A-6})$$

Para  $\alpha \neq 0$ :

$$\Sigma_{\beta\alpha} = -2i \int_0^\infty dt e^{izt} \sum_{\gamma, \delta} (1 - \delta_{\beta\gamma})(1 - \delta_{\alpha\delta}) \text{Re} \langle \tilde{V}_\gamma(t) \tilde{V}_\delta \rangle \text{Tr} (\sigma_\beta \sigma_\gamma e^{ith\sigma_z} \sigma_\delta \sigma_\alpha e^{-ith\sigma_z}) \quad (\text{A-7})$$

El cálculo realizado es para un acoplamiento en general donde existen todas las componentes para el operador  $V$ , es decir  $\mathbf{V} \cdot \sigma^c = V_x \sigma_x + V_y \sigma_y + V_z \sigma_z$ ; en la matriz puede observarse la dependencia directa de algunos términos con el campo magnético externo, esta relación se encuentra en las energías definidas en cada nivel para la polarización del espín.

$$A(z) = \begin{pmatrix} z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z - \Sigma_{xx} & 2ih - \Sigma_{xy} & 0 \\ 0 & 2ih - \Sigma_{yx} & z - \Sigma_{yy} & 0 \\ \Sigma_{z0} & 0 & 0 & z - \Sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Donde:

$$\begin{aligned} \Sigma_{xx} = \Sigma_{yy} &= -2 \sum_{kk' \alpha = \pm} \left[ \frac{n_{k\uparrow}(1 - n_{k'\downarrow})}{z + \alpha(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k'\downarrow})} + \frac{n_{k\downarrow}(1 - n_{k'\uparrow})}{z + \alpha(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k'\uparrow})} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\sigma = \uparrow\downarrow} (n_{k\sigma}(1 - n_{k'\sigma})) \frac{z + \alpha(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{k'\sigma})}{(z + \alpha(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{k'\sigma}))^2 - (2h)^2} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{yx} = -\Sigma_{xy} &= -4 \sum_{kk'} \left[ (n_{k\uparrow}(1 - n_{k'\downarrow})) \frac{(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k'\downarrow})}{z^2 - (\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k'\downarrow})^2} + (n_{k\downarrow}(1 - n_{k'\uparrow})) \frac{(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k'\uparrow})}{z^2 - (\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k'\uparrow})^2} \right] \\ &\quad + 4 \sum_{kk' \sigma = \uparrow\downarrow} (n_{k\sigma}(1 - n_{k'\sigma})) \left[ \frac{h}{(z + \alpha(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{k'\sigma}))^2 - (2h)^2} \right] \end{aligned}$$

$$\Sigma_{zz} = \Sigma_{z0} = -4 \sum_{kk'\sigma=\pm} (z + 2\sigma h) \left[ \frac{n_{k\uparrow}(1 - n_{k'\downarrow})}{(z + \sigma 2h)^2 - (\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k'\downarrow})^2} + \frac{n_{k\downarrow}(1 - n_{k'\uparrow})}{(z + \sigma 2h)^2 - (\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k'\uparrow})^2} \right]$$

Para un acople Ising  $\rightarrow \mathbf{V} \cdot \sigma^c = V_x \sigma_x$ , entonces las correlaciones dependientes de  $y$  y  $z$  desaparecen, así los términos de la matriz  $A(z)$  serían:

$$A(z) = \left( \begin{array}{c|c|c|c} z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z & 2ih & 0 \\ 0 & 2ih & z - \Sigma_{yy} & 0 \\ \Sigma_{z0} & 0 & 0 & z - \Sigma_{zz} \end{array} \right)$$

$$\Sigma_{z0} = = -i4h \sum_{kk'\alpha=\pm} \left[ \frac{n_{k\uparrow}(1 - n_{k'\downarrow})}{(z + \alpha(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k'\downarrow}))^2 - (2h)^2} + \frac{n_{k\downarrow}(1 - n_{k'\uparrow})}{(z + \alpha(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k'\uparrow}))^2 - (2h)^2} \right] \quad (A-8)$$

$$\Sigma_{yy} = = -2 \sum_{kk'\alpha=\pm} \left[ \frac{n_{k\uparrow}(1 - n_{k'\downarrow})}{z + \alpha(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k'\downarrow})} + \frac{n_{k\downarrow}(1 - n_{k'\uparrow})}{z + \alpha(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k'\uparrow})} \right] \quad (A-9)$$

$$\Sigma_{zz} = -2 \sum_{kk'\sigma=\pm} (z + 2\sigma h) \left[ \frac{n_{k\uparrow}(1 - n_{k'\downarrow})}{(z + \sigma 2h)^2 - (\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k'\downarrow})^2} + \frac{n_{k\downarrow}(1 - n_{k'\uparrow})}{(z + \sigma 2h)^2 - (\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k'\uparrow})^2} \right]$$

Para un acople Ising  $\rightarrow \mathbf{V} \cdot \sigma^c = V_z \sigma_z$ , entonces las correlaciones dependientes de  $y$  y  $x$  desaparecen, así los términos de la matriz  $A(z)$  serían:

$$A(z) = \left( \begin{array}{c|c|c|c} z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z - \Sigma_{xx} & 2ih + \Sigma_{xy} & 0 \\ 0 & 2ih - \Sigma_{yx} & z - \Sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z \end{array} \right)$$

$$\Sigma_{xx} = \Sigma_{yx} = \Sigma_{xy} = \Sigma_{yy} = -2 \sum_{kk'\alpha=\pm} (n_{k\sigma}(1 - n_{k'\sigma})) \frac{z + \alpha(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{k'\sigma})}{(z + \alpha(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{k'\sigma}))^2 - (2h)^2} \quad (A-10)$$

## B. Anexo: Coeficientes Diodo Térmico DM

Los coeficientes mostrados en la ecuación 3-16, provienen de las proyecciones realizadas al calcular el súper operador de Lindblad, estos coeficientes no dependen de la temperatura de los reservorios y contienen la dependencia de las variables del sistema con el entorno. Para el reservorio  $L$ :

- Para el reservorio  $L$ :

$$\begin{aligned}
 \alpha_L &= \frac{4\eta^2(A^+B^+)^2}{1+D^2} (4\chi(\delta-\zeta)(\Delta+2\xi) + 4(1+D^2)(\delta-\zeta)^2 + \chi^2(\Delta+2\xi)^2) \\
 \beta_L &= \frac{4\eta^2(A^-B^-)^2}{1+D^2} (4\chi(\delta+\zeta)(\Delta-2\xi) + 4(1+D^2)(\delta+\zeta)^2 + \chi^2(\Delta-2\xi)^2) \\
 \gamma_L &= \frac{4\eta^2(A^+B^-)^2}{D^2+1} (4\chi(\delta+\zeta)(\Delta+2\xi) + 4(D^2+1)(\delta+\zeta)^2 + \chi^2(\Delta+2\xi)^2) \\
 \delta_L &= \frac{4\eta^2(A^-B^+)^2}{1+D^2} (4\chi(\delta-\zeta)(\Delta-2\xi) + 4(1+D^2)(\delta-\zeta)^2 + \chi^2(\Delta-2\xi)^2)
 \end{aligned} \tag{B-1}$$

- Para el reservorio  $R$ :

$$\begin{aligned}
 \alpha_R &= \frac{4(A^+B^+)^2}{1+D^2} (4\eta^2\chi(\delta-\zeta)(\Delta+2\xi) + (\delta-\zeta)^2(\Delta+2\xi)^2 + 4(1+D^2)\eta^4\chi^2) \\
 \beta_R &= \frac{4(A^-B^-)^2}{1+D^2} (4\eta^2\chi(\delta+\zeta)(\Delta-2\xi) + (\delta+\zeta)^2(\Delta-2\xi)^2 + 4(1+D^2)\eta^4\chi^2) \\
 \gamma_R &= \frac{4(A^+B^-)^2}{1+D^2} (4\eta^2\chi(\delta+\zeta)(\Delta+2\xi) + (\delta+\zeta)^2(\Delta+2\xi)^2 + 4(1+D^2)\eta^4\chi^2) \\
 \delta_R &= \frac{4(A^-B^+)^2}{1+D^2} (4\eta^2\chi(\delta-\zeta)(\Delta-2\xi) + (\delta-\zeta)^2(\Delta-2\xi)^2 + 4(1+D^2)\eta^4\chi^2)
 \end{aligned} \tag{B-2}$$

## C. Anexo: Coeficientes Transistor Térmico DM

Los coeficientes mostrados en los estados vestidos de la ecuación 3-25, estos estados provienen de la ortonormalización y se expresan como sigue.

$$\begin{aligned}
 A_1^\pm &= \frac{(\eta_R^2 ((\pm 1 \pm D^2) \mp x^2) \mp (D^2 + 3\chi^2 + 1) \eta_L^2) + \epsilon}{2\chi\eta_L} \\
 B_2^\pm &= \frac{(D^2 - \chi^2 + 1) (\eta_L^2 + \eta_R^2) \pm \epsilon}{\chi\eta_L\eta_R} \\
 B_1^\pm &= \frac{(D^2 - \chi^2 + 1) (\eta_L^2 - \eta_R^2) \pm \epsilon}{2(D^2 + \chi^2 + 1) \eta_L\eta_R} \\
 C_1^\pm &= \frac{(D^2 - \chi^2 + 1) \eta_L^2 + (D^2 + 3\chi^2 + 1) \eta_R^2 \pm \epsilon}{(d^2 + \chi^2 + 1) \eta_R} \\
 C_2^\pm &= \frac{\pm (D^2 - \chi^2 + 1) \eta_L^2 \pm (D^2 + 3\chi^2 + 1) \eta_R^2 + \epsilon}{2\chi\eta_R} \\
 D_1^\pm &= \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{A_1^-}{\xi \pm \omega m}\right)^2 + (B_1^+)^2 + (d^2 + 1) \left(\frac{C_1^+}{\xi \pm \omega m}\right)^2 + 1}} \\
 D_2^\pm &= \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{A_2^+}{\xi \pm \omega m}\right)^2 + \frac{(B_2^+)^2}{d^2 + 1} + \left(\frac{C_2^+}{\xi \pm \omega m}\right)^2 + 1}} \\
 D_3^\pm &= \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{(A_1)^+}{\zeta \pm \omega m}\right)^2 + (B_1^-)^2 + (d^2 + 1) \left(\frac{C_1^-}{\zeta \pm \omega m}\right)^2 + 1}} \\
 D_4^\pm &= \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{A_2^-}{\zeta \pm \omega m}\right)^2 + \frac{(B_2^-)^2}{d^2 + 1} + \left(\frac{C_2^-}{\zeta \pm \omega m}\right)^2 + 1}}
 \end{aligned} \tag{C-1}$$

Los coeficientes mostrados en la ecuación 3-29, provienen de las proyecciones realizadas al calcular el operador Louvilliano, estos coeficientes no dependen de la temperatura de los reservorios y contienen la dependencia de las variables del sistema con el entorno. A continuación, se mostrarán los coeficientes presentes en la ecuación de la corriente 3-29 para el caso específico presentado con  $\chi = D = 0$  y  $\eta_L = \eta_R$ .

- Para el reservorio  $L$ :

$$\begin{aligned}
\alpha_L &= \frac{(D_1^- D_4^-)^2 (A_1^- C_2^- + (\zeta - \omega_m) (B_2^- C_1^+ + (B_2^- + B_1^+) (\xi - \omega_m)))^2}{(\zeta - \omega_m)^2 (\xi - \omega_m)^2} \\
\beta_L &= \frac{(D_2^- D_3^-)^2 (A_2^+ C_1^- - A_1^+ C_2^+ + (B_1^- + B_2^+) (\zeta - \omega_M) (\xi - \omega_M))^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\gamma_L &= \frac{(D_2^+ D_3^+)^2 (A_2^+ C_1^- - A_1^+ C_2^+ + (B_1^- - B_2^+) (\zeta + \omega_M) (\omega_M + \xi))^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\delta_L &= \frac{(D_1^+ D_4^+)^2 (A_1^- C_2^- + A_2^- C_1^+ - (B_2^- - B_1^+) (\zeta + \omega_M) (\omega_M + \xi))^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\theta_L &= \frac{(D_1^- D_4^+)^2 (A_1^- C_2^- + A_2^- C_1^+ - (B_2^- + B_1^+) (\zeta + \omega_M) (\xi - \omega_M))^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\iota_L &= \frac{(D_2^- D_3^+)^2 (-A_2^+ C_1^- + A_1^+ C_2^+ + (B_1^- + B_2^+) (\zeta + \omega_M) (\xi - \omega_M))^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\kappa_L &= \frac{(D_3^- D_2^+)^2 (A_2^+ C_1^- + A_1^+ C_2^+ + (B_1^- - B_2^+) (\zeta - \omega_M) (\omega_M + \xi))^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\mu_L &= \frac{(D_4^- D_1^+)^2 (A_1^- C_2^- + A_2^- C_1^+ - (B_2^- + B_1^+) (\zeta - \omega_M) (\omega_M + \xi))^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\sigma_L &= \frac{(D_3^- D_4^+)^2 (A_2^- C_1^- + A_1^+ C_2^- + (B_1^- + B_2^-) (-\zeta^2 + \omega_M^2))^2}{(\zeta^2 - \omega_M^2)^2} \\
\tau_L &= \frac{(D_4^- D_3^+)^2 (A_2^- C_1^- - A_1^+ C_2^- + (B_1^- + B_2^-) (\zeta^2 - \omega_M^2))^2}{(\zeta^2 - \omega_M^2)^2} \\
\nu_L &= \frac{(D_1^- D_2^+)^2 (A_2^+ C_1^+ + A_1^- C_2^+ + (B_1^+ - B_2^+) (\xi^2 - \omega_M^2))^2}{(\xi^2 - \omega_M^2)^2} \\
\psi_L &= \frac{(D_2^- D_1^+)^2 (A_2^+ C_1^+ + A_1^- C_2^+ + (B_1^+ + B_2^+) (\xi^2 - \omega_M^2))^2}{(\xi^2 - \omega_M^2)^2}
\end{aligned} \tag{C-2}$$

■ Para el reservorio  $R$ :

$$\begin{aligned}
\alpha_R &= \frac{(D_1^- D_4^-)^2 (A_1^- A_2^- + B_2^- B_1^+ (\zeta - \omega_M) (\xi - \omega_M) + C_2^- C_1^+ + \zeta \xi - \omega_M (\zeta - \omega_M + \xi))^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\beta_R &= \frac{(D_2^- D_3^-)^2 (-A_1^+ A_2^+ + B_1^- B_2^+ (\zeta - \omega_M) (\xi - \omega_M) + C_1^- C_2^+ + \zeta \xi - \omega_M (\zeta - \omega_M + \xi))^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\gamma_R &= \frac{(D_2^+ D_3^+)^2 (-A_1^+ A_2^+ - B_1^- B_2^+ (\zeta + \omega_M) (\omega_M + \xi) + C_1^- C_2^+ + \zeta \xi + \omega_M (\zeta + \omega_M + \xi))^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\delta_R &= \frac{(D_1^+ D_4^+)^2 (A_1^- A_2^- - B_2^- B_1^+ (\zeta + \omega_M) (\omega_M + \xi) + C_2^- C_1^+ + \zeta \xi + \omega_M (\zeta + \omega_M + \xi))^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\theta_R &= \frac{(D_1^- D_4^+)^2 (A_1^- A_2^- + B_2^- B_1^+ (\zeta + \omega_M) (\omega_M - \xi) + C_2^- C_1^+ - \zeta \xi + \omega_M (\zeta + \omega_M - \xi))^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\iota_R &= \frac{(D_2^- D_3^+)^2 (A_1^+ A_2^+ + B_1^- B_2^+ (\zeta + \omega_M) (\xi - \omega_M) - C_1^- C_2^+ + \zeta \xi - \omega_M (\zeta + \omega_M - \xi))^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\kappa_R &= \frac{(D_3^- D_2^+)^2 (A_1^+ A_2^+ - B_1^- B_2^+ (\zeta - \omega_M) (\omega_M + \xi) + C_1^- C_2^+ + \zeta \xi - \omega_M (-\zeta + \omega_M + \xi))^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\mu_R &= \frac{(D_4^- D_1^+)^2 (-A_1^- A_2^- + B_2^- B_1^+ (\zeta - \omega_M) (\omega_M + \xi) - C_2^- C_1^+ + \zeta \xi + \omega_M (\zeta - \omega_M - \xi))^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\sigma_R &= \frac{(D_3^- D_4^+)^2 (A_2^- A_1^+ - B_1^- B_2^- \zeta^2 + (B_1^- B_2^- + 1) \omega_M^2 + C_1^- C_2^- - \zeta^2)^2}{(\zeta^2 - \omega_M^2)^2} \\
\tau_R &= \frac{(D_4^- D_3^+)^2 (-A_2^- A_1^+ + B_1^- B_2^- \zeta^2 - (B_1^- B_2^- + 1) \omega_M^2 + C_1^- C_2^- + \zeta^2)^2}{(\zeta^2 - \omega_M^2)^2} \\
\nu_R &= \frac{(D_1^- D_2^+)^2 (A_1^- A_2^+ + (B_1^+ B_2^+ - 1) \omega_M^2 - B_1^+ B_2^+ \xi^2 + C_1^+ C_2^+ + \xi^2)^2}{(\xi^2 - \omega_M^2)^2} \\
\psi_R &= \frac{(D_2^- D_1^+)^2 (A_1^- A_2^+ - (B_1^+ B_2^+ + 1) \omega_M^2 + B_1^+ B_2^+ \xi^2 + C_1^+ C_2^+ + \xi^2)^2}{(\xi^2 - \omega_M^2)^2}
\end{aligned}$$

(C-3)

- Para el reservorio  $M$ :

$$\begin{aligned}
\alpha_M &= \frac{(D_1^- D_4^-)^2 \left( (A_2^- B_1^+ + C_2^-) (\xi - \omega_M) + A_1^- B_2^- (\zeta - \omega_M) + C_1^+ (\zeta - \omega_M) \right)^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\beta_M &= \frac{(D_2^- D_3^-)^2 \left( A_2^+ B_1^- (\zeta - \omega_M) + A_1^+ B_2^+ (\omega_M - \xi) + C_2^+ (\zeta - \omega_M) + C_1^- (\xi - \omega_M) \right)^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\gamma_M &= \frac{(D_2^+ D_3^+)^2 \left( A_2^+ B_1^- (\zeta + \omega_M) + A_1^+ B_2^+ (\omega_M + \xi) + C_2^+ (\zeta + \omega_M) + C_1^- (\omega_M + \xi) \right)^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\delta_M &= \frac{(D_1^+ D_4^+)^2 \left( (A_2^- B_1^+ + C_2^-) (\omega_M + \xi) - A_1^- B_2^- (-\zeta + \omega_M) + C_1^+ (\zeta + \omega_M) \right)^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\theta_L &= \frac{(D_1^- D_4^+)^2 \left( - (A_2^- B_1^+ + C_2^-) (\xi - \omega_M) + A_1^- B_2^- (\zeta + \omega_M) + C_1^+ (\zeta + \omega_M) \right)^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\iota_M &= \frac{(D_2^- D_3^+)^2 \left( A_2^+ B_1^- (\zeta + \omega_M) + A_1^+ B_2^+ (\xi - \omega_M) + C_2^+ (\zeta + \omega_M) + C_1^- (\omega_M - \xi) \right)^2}{(\zeta + \omega_M)^2 (\xi - \omega_M)^2} \\
\kappa_M &= \frac{(D_3^- D_2^+)^2 \left( A_2^+ B_1^- (\zeta - \omega_M) - A_1^+ B_2^+ (\omega_M + \xi) + C_2^+ (\zeta - \omega_M) + C_1^- (\omega_M + \xi) \right)^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\mu_M &= \frac{(D_4^- D_1^+)^2 \left( (A_2^- B_1^+ + C_2^-) (\omega_M + \xi) + A_1^- B_2^- (\omega_M - \zeta) + C_1^+ (\omega_M - \zeta) \right)^2}{(\zeta - \omega_M)^2 (\omega_M + \xi)^2} \\
\sigma_M &= \frac{(D_3^- D_4^+)^2 \left( A_2^- B_1^- (\omega_M - \zeta) + A_1^+ B_2^- (\zeta + \omega_M) + C_1^- (\zeta + \omega_M) + C_2^- (\omega_M - \zeta) \right)^2}{(\zeta^2 - \omega_M^2)^2} \\
\tau_M &= \frac{(D_4^- D_3^+)^2 \left( A_2^- B_1^- (\zeta + \omega_M) + A_1^+ B_2^- (\omega_M - \zeta) + C_1^- (\zeta - \omega_M) + C_2^- (\zeta + \omega_M) \right)^2}{(\zeta^2 - \omega_M^2)^2} \\
\nu_M &= \frac{(D_1^- D_2^+)^2 \left( - (A_1^- B_2^+ - C_1^+) (\omega_M + \xi) + A_2^+ B_1^+ (\xi - \omega_M) + C_2^+ (\xi - \omega_M) \right)^2}{(\xi^2 - \omega_M^2)^2} \\
\psi_M &= \frac{(D_2^- D_1^+)^2 \left( (A_1^- B_2^+ + C_1^+) (\xi - \omega_M) + A_2^+ B_1^+ (\omega_M + \xi) + C_2^+ (\omega_M + \xi) \right)^2}{(\xi^2 - \omega_M^2)^2}
\end{aligned}$$

(C-4)



# Bibliografía

- [1] P. Ben-Abdallah and S.-A. Biehs, “Contactless heat flux control with photonic devices,” *AIP Advances*, vol. 5, no. 5, pp.–, 2015.
- [2] D. Segal, “Two-level system in spin baths: Non-adiabatic dynamics and heat transport,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 140, no. 16, pp.–, 2014.
- [3] L.-A. Wu and D. Segal, “Energy flux operator, current conservation and the formal fourier’s law,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 42, no. 2, p. 025302, 2009.
- [4] N. Li, J. Ren, L. Wang, G. Zhang, P. Hänggi, and B. Li, “*Colloquium* : Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 84, pp. 1045–1066, Jul 2012.
- [5] A. Fornieri, M. J. Martínez-Pérez, and F. Giazotto, “Electronic heat current rectification in hybrid superconducting devices,” *AIP Advances*, vol. 5, no. 5, pp.–, 2015.
- [6] S. Chen, E. Pereira, and G. Casati, “Ingredients for an efficient thermal diode,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 111, no. 3, p. 30004, 2015.
- [7] D. Oettinger, R. Chitra, and J. Restrepo, “Heat current characteristics in nanojunctions with superconducting baths,” *The European Physical Journal B*, vol. 87, no. 10, 2014.
- [8] M. J. Martínez-Pérez, A. Fornieri, and F. Giazotto, “Rectification of electronic heat current by a hybrid thermal diode,” *Nat Nano*, vol. 10, pp. 303–307, 05 2015.
- [9] “Semiconductors on nsm.”
- [10] T. Werlang, M. A. Marchiori, M. F. Cornelio, and D. Valente, “Optimal rectification in the ultrastrong coupling regime,” *Phys. Rev. E*, vol. 89, p. 062109, Jun 2014.
- [11] D. Segal, “Heat flow in nonlinear molecular junctions: Master equation analysis,” *Physical Review B*, vol. 73, no. 20, p. 205415, 2006.
- [12] L.-A. Wu, C. X. Yu, and D. Segal, “Nonlinear quantum heat transfer in hybrid structures: Sufficient conditions for thermal rectification,” *Phys. Rev. E*, vol. 80, p. 041103, Oct 2009.

- 
- [13] A. Fornieri, M. J. Martínez-Pérez, and F. Giazotto, “A normal metal tunnel-junction heat diode,” *Applied Physics Letters*, vol. 104, no. 18, pp.–, 2014.
- [14] A. Fornieri, M. J. Martínez-Pérez, and F. Giazotto, “Electronic heat current rectification in hybrid superconducting devices,” *AIP Advances*, vol. 5, no. 5, pp.–, 2015.
- [15] J. Ordonez-Miranda, Y. Ezzahri, and K. Joulain, “Quantum thermal diode based on two interacting spinlike systems under different excitations,” *Phys. Rev. E*, vol. 95, p. 022128, Feb 2017.
- [16] L. Wang and B. Li, “Phononics gets hot,” *Physics World*, vol. 21, no. 03, p. 27, 2008.
- [17] S. Chen, E. Pereira, and G. Casati, “Ingredients for an efficient thermal diode,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 111, no. 3, p. 30004, 2015.
- [18] G. Kurizki, P. Bertet, Y. Kubo, K. Mølmer, D. Petrosyan, P. Rabl, and J. Schmiedmayer, “Quantum technologies with hybrid systems,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 112, no. 13, pp. 3866–3873, 2015.
- [19] J. Jing, D. Segal, B. Li, and L.-A. Wu, “Transient unidirectional energy flow and diode-like phenomenon induced by non-Markovian environments,” *Scientific Reports*, vol. 5, p. 15332, Oct. 2015.
- [20] B. Li, L. Wang, and G. Casati, “Negative differential thermal resistance and thermal transistor,” *Applied Physics Letters*, vol. 88, no. 14, p. 143501, 2006.
- [21] J.-H. Jiang, M. Kulkarni, D. Segal, and Y. Imry, “Phonon thermoelectric transistors and rectifiers,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 045309, Jul 2015.
- [22] K. Joulain, J. Drevillon, Y. Ezzahri, and J. Ordonez-Miranda, “Quantum thermal transistor,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, p. 200601, May 2016.
- [23] Z.-X. Man, N. B. An, and Y.-J. Xia, “Controlling heat flows among three reservoirs asymmetrically coupled to two two-level systems,” *Phys. Rev. E*, vol. 94, p. 042135, Oct 2016.
- [24] M. J. Martínez-Pérez, A. Fornieri, and F. Giazotto, “Rectification of electronic heat current by a hybrid thermal diode,” *Nat Nano*, vol. 10, pp. 303–307, 05 2015.
- [25] H. Wang, S. Hu, K. Takahashi, X. Zhang, H. Takamatsu, and J. Chen, “Experimental study of thermal rectification in suspended monolayer graphene,” *Nature Communications*, vol. 8, pp. 15843 EP –, 06 2017.

- [26] Z. Meng, R. Gulfam, P. Zhang, and F. Ma, “Supercooling-enabled giant and tunable thermal rectification ratio of a phase change thermal diode,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1810.06901, Oct. 2018.
- [27] J. W. Jiang, J. S. Wang, and B. Li, “Topology-induced thermal rectification in carbon nanodevice,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 89, no. 4, p. 46005, 2010.
- [28] T. Chen and X.-B. Wang, “Thermal rectification in the nonequilibrium quantum-dots-system,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 72, pp. 58 – 62, 2015.
- [29] L. Tang and M. Francoeur, “Photonic thermal diode enabled by surface polariton coupling in nanostructures,” *Opt. Express*, vol. 25, pp. A1043–A1052, Nov 2017.
- [30] J. Lu, R. Wang, J. Ren, M. Kulkarni, and J.-H. Jiang, “Quantum Dot circuit-QED thermoelectric diodes and transistors,” *ArXiv e-prints*, July 2018.
- [31] G. Benenti, G. Casati, K. Saito, and R. Whitney, “Fundamental aspects of steady-state conversion of heat to work at the nanoscale,” *Physics Reports*, vol. 694, pp. 1 – 124, 2017. Fundamental aspects of steady-state conversion of heat to work at the nanoscale.
- [32] R. S. Whitney, R. Sanchez, and J. Splettstoesser, “Quantum thermodynamics of nanoscale thermoelectrics and electronic devices,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1805.04297, May 2018.
- [33] P. Strasberg, G. Schaller, N. Lambert, and T. Brandes, “Nonequilibrium thermodynamics in the strong coupling and non-Markovian regime based on a reaction coordinate mapping,” *ArXiv e-prints*, Feb. 2016.
- [34] R. Schmidt, M. F. Carusela, J. P. Pekola, S. Suomela, and J. Ankerhold, “Work and heat for two-level systems in dissipative environments: Strong driving and non-markovian dynamics,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 224303, Jun 2015.
- [35] D. Gelbwaser-Klimovsky and A. Aspuru-Guzik, “Strongly coupled quantum heat machines,” *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 6, no. 17, pp. 3477–3482, 2015. PMID: 26291720.
- [36] R. Uzdin, A. Levy, and R. Kosloff, “Quantum heat machines equivalence and work extraction beyond Markovianity, and strong coupling via heat exchangers,” *ArXiv e-prints*, Feb. 2016.
- [37] D. Gelbwaser-Klimovsky, W. Niedenzu, P. Brumer, and G. Kurizki, “Power enhancement of heat engines via correlated thermalization in a three-level “working fluid”,” *Scientific Reports*, vol. 5, pp. 14413 EP –, 09 2015.

- [38] W. L. Ribeiro, G. T. Landi, and F. L. Semião, “Quantum thermodynamics and work fluctuations with applications to magnetic resonance,” *American Journal of Physics*, vol. 84, no. 12, pp. 948–957, 2016.
- [39] D. Kast and J. Ankerhold, “Dynamics of quantum coherences at strong coupling to a heat bath,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 134301, Apr 2013.
- [40] E. Pereira, “Sufficient conditions for thermal rectification in general graded materials,” *Physical Review E*, vol. 83, no. 3, p. 031106, 2011.
- [41] A. Fornieri, M. J. Martínez-Pérez, and F. Giazotto, “A normal metal tunnel-junction heat diode,” *Applied Physics Letters*, vol. 104, no. 18, pp.–, 2014.
- [42] G. Casati and B. Li, *Non-Linear Dynamics and Fundamental Interactions: Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop on Non-Linear Dynamics and Fundamental Interactions Tashkent, Uzbekistan October 10–16, 2004*, ch. Heat conduction in one dimensional systems: Fourier law, chaos, and heat control, pp. 1–16. Dordrecht: Springer Netherlands, 2006.
- [43] T. Chen and X.-B. Wang, “Thermal rectification in the nonequilibrium quantum-dots-system,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 72, pp. 58 – 62, 2015.
- [44] H.-P. Breuer, E.-M. Laine, J. Piilo, and B. Vacchini, “Non-Markovian dynamics in open quantum systems,” *ArXiv e-prints*, May 2015.
- [45] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The theory of open quantum systems*. Oxford university press, 2002.
- [46] B. Schumacher and M. Westmoreland, *decoherence and the quantum-to-classical transition*. Cambridge University Press, 2010.
- [47] Á. Rivas and S. F. Huelga, *Open Quantum Systems*. Springer, 2012.
- [48] T. M. Nieuwenhuizen, C. Pombo, C. Furtado, A. Y. Khrennikov, I. A. Pedrosa, and V. Špička, *FRONT MATTER*, pp. i–viii.
- [49] D. P. DiVincenzo, “Two-bit gates are universal for quantum computation,” *Phys. Rev. A*, vol. 51, pp. 1015–1022, Feb 1995.
- [50] B. Schumacher and M. Westmoreland, *Quantum Processes Systems, and Information*. Cambridge University Press, 2010.

- 
- [51] H. Wichterich, M. J. Henrich, H.-P. Breuer, J. Gemmer, and M. Michel, “Modeling heat transport through completely positive maps,” *Phys. Rev. E*, vol. 76, p. 031115, Sep 2007.
- [52] L.-A. Wu, C. X. Yu, and D. Segal, “Nonlinear quantum heat transfer in hybrid structures: Sufficient conditions for thermal rectification,” *Phys. Rev. E*, vol. 80, p. 041103, Oct 2009.
- [53] F. Giazotto and F. S. Bergeret, “Thermal rectification of electrons in hybrid normal metal-superconductor nanojunctions,” *Applied Physics Letters*, vol. 103, p. 242602, Dec. 2013.
- [54] S. Kato and T. Aoki, “Strong Coupling between a Trapped Single Atom and an All-Fiber Cavity,” *Physical Review Letters*, vol. 115, p. 093603, Aug. 2015.
- [55] J. Ren and J.-X. Zhu, “Heat diode effect and negative differential thermal conductance across nanoscale metal-dielectric interfaces,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 241412, Jun 2013.
- [56] T. Ojanen, “Selection-rule blockade and rectification in quantum heat transport,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 180301, Nov 2009.
- [57] D. Manzano, M. Tiersch, A. Asadian, and H. J. Briegel, “Quantum transport efficiency and fourier’s law,” *Phys. Rev. E*, vol. 86, p. 061118, Dec 2012.
- [58] H. van Houten, L. W. Molenkamp, C. W. J. Beenakker, and C. T. Foxon, “Thermoelectric properties of quantum point contacts,” *Semiconductor Science and Technology - SEMICOND SCI TECHNOL*, vol. 7, 03 1992.
- [59] A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, “Skyrmions on the track,” *Nature Nanotechnology*, vol. 8, pp. 152 EP –, 03 2013.
- [60] R. S. Whitney, “Non-Markovian quantum thermodynamics: laws and fluctuation theorems,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1611.00670, Nov. 2016.
- [61] T. Ruokola, T. Ojanen, and A.-P. Jauho, “Thermal rectification in nonlinear quantum circuits,” *Phys. Rev. B*, vol. 79, p. 144306, Apr 2009.
- [62] E. Nefzaoui, K. Joulain, J. Drevillon, and Y. Ezzahri, “Radiative thermal rectification using superconducting materials,” *Applied Physics Letters*, vol. 104, no. 10, p. 103905, 2014.
- [63] F. Giazotto and F. S. Bergeret, “Thermal rectification of electrons in hybrid normal metal-superconductor nanojunctions,” *Applied Physics Letters*, vol. 103, p. 242602, Dec. 2013.

- [64] S.-Y. Hwang and D. Sanchez, “Nonlinear heat transport in ferromagnetic-quantum dot-superconducting systems,” in *Journal of Physics Conference Series*, vol. 969 of *Journal of Physics Conference Series*, p. 012139, Mar. 2018.
- [65] B. Karimi, J. P. Pekola, M. Campisi, and R. Fazio, “Coupled qubits as a quantum heat switch,” *Quantum Science and Technology*, vol. 2, p. 044007, Dec. 2017.
- [66] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and A. Zettl, “Solid-state thermal rectifier,” *Science*, vol. 314, no. 5802, pp. 1121–1124, 2006.
- [67] A. L. Cottrill, S. Wang, A. T. Liu, W.-J. Wang, and M. S. Strano, “Dual phase change thermal diodes for enhanced rectification ratios: Theory and experiment,” *Advanced Energy Materials*, vol. 8, no. 11, p. 1702692.
- [68] J. Restrepo, R. Chitra, S. Camalet, and E. Dupont, “Effect of a gap on the decoherence of a qubit,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 245109, Dec 2011.
- [69] E. A. Winograd, M. J. Rozenberg, and R. Chitra, “Weak-coupling study of decoherence of a qubit in disordered magnetic environments,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 214429, Dec 2009.
- [70] N. Yamada, A. Sakuma, and H. Tsuchiura, “Decoherence processes of a quantum two-level system coupled to a fermionic environment,” *Journal of Applied Physics*, vol. 101, no. 9, p. 09C110, 2007.
- [71] C. L. Tang, *Fundamentals of Quantum Mechanics: For Solid State Electronics and Optics*. Cambridge University Press, 2005.
- [72] J. Restrepo, *Decoherence et thermalisation des Systèmes quantiques*. PhD thesis, L’Université Pierre et Marie Curie, 2011.
- [73] L.-A. Wu and D. Segal, “Quantum heat transfer: A born-oppenheimer method,” *Phys. Rev. E*, vol. 83, p. 051114, May 2011.
- [74] P. C. Cárdenas, N. Quesada, H. Vinck-Posada, and B. A. Rodríguez, “Strong coupling of two interacting excitons confined in a nanocavity–quantum dot system,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 23, no. 26, p. 265304, 2011.
- [75] K. V. Kavokin, “Anisotropic exchange interaction of localized conduction-band electrons in semiconductors,” *Physical Review B*, vol. 64, p. 075305, Aug. 2001.
- [76] F. Kheirandish, S. J. Akhtarshenas, and H. Mohammadi, “Non-equilibrium entanglement dynamics of a two-qubit heisenberg xy system in the presence of an inhomogeneous

- magnetic field and spin-orbit interaction,” *The European Physical Journal D*, vol. 57, pp. 129–140, Mar 2010.
- [77] T. Moriya, “Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism,” *Phys. Rev.*, vol. 120, pp. 91–98, Oct 1960.
- [78] I. Dzyaloshinsky, “A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 4, no. 4, pp. 241 – 255, 1958.
- [79] S. Jaiswal, K. Litzius, I. Lemesh, F. Büttner, S. Finizio, J. Raabe, M. Weigand, K. Lee, J. Langer, B. Ocker, G. Jakob, G. S. D. Beach, and M. Kläui, “Investigation of the dzyaloshinskii-moriya interaction and room temperature skyrmions in w/cofeb/mgo thin films and microwires,” *Applied Physics Letters*, vol. 111, no. 2, p. 022409, 2017.
- [80] B. Dijk, “Skyrmions and the dzyaloshinskii-moriya interaction,” 2014.
- [81] A. Pfund, I. Shorubalko, K. Ensslin, and R. Leturcq, “Spin-state mixing in InAs double quantum dots,” *Physical Review B*, vol. 76, p. 161308, Oct. 2007.