

Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California



Maestría en Ciencias en Física de Materiales

Correlaciones cuánticas y su relación con la eficiencia en máquinas térmicas de arreglos de puntos cuánticos

Tesis

para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de
Maestro en Ciencias

Presenta:

Tarek Alfredo Naime Jorge

Ensenada, Baja California, México
2016

Tesis defendida por
Tarek Alfredo Naime Jorge

y aprobada por el siguiente Comité

Dr. Fernando Rojas Iñiguez
Director de tesis

Dr. Ernesto Cota Araiza

Dr. Armando Reyes Serrato

Dr. Arturo Arvizu Mondragón



Dr. Leonel Susano Cota Araiza
Coordinador del Posgrado en Física de Materiales

Dra. Rufina Hernández Martínez
Directora de Estudios de Posgrado

Resumen de la tesis que presenta **Tarek Alfredo Naime Jorge** como requisito parcial para la obtención del grado de Maestro en Ciencias en Física de Materiales.

Correlaciones cuánticas y su relación con la eficiencia en máquinas térmicas de arreglos de puntos cuánticos

Resumen aprobado por:

Dr. Fernando Rojas Iñiguez
Director de tesis

En este trabajo se estudian las propiedades no clásicas de una máquina térmica compuesta por un arreglo de cuatro puntos cuánticos con hasta dos electrones. Se consideran interacción coulombiana entre electrones en los puntos cuánticos, tuneleo vertical y los puntos cuánticos están acoplados a reservorios térmicos fermiónicos, los cuales se encuentran a diferentes temperaturas. Se determinan los estados y las funciones características del arreglo de puntos cuánticos cerrado (sin el acoplamiento a reservorios), para uno y dos electrones, como función del tuneleo. Se obtienen las ecuaciones maestras markovianas para la matriz de densidad del sistema cuántico abierto (acoplado a los reservorios) y se obtiene la matriz de densidad en equilibrio con 0, 1 y 2 electrones en el sistema. Estudiamos las relaciones que existen entre las poblaciones, el flujo de calor, energía promedio y las correlaciones cuánticas (discordia y concurrencia) como función de las temperaturas caliente (T_H) y fría (T_C). Se analizó la máquina térmica en dos situaciones: energías de sitio iguales, (con un valor de cero) y energías de sitio diferentes. Los resultados de las correlaciones cuánticas en función de la temperatura (T_H y T_C) muestran que la concurrencia (separabilidad de estados) es una propiedad marginal para el sistema y la discordia es la correlación dominante en el proceso de flujo de calor y poblaciones. Las corrientes de calor por sitio muestran un comportamiento lineal con la discordia paramétricamente con T_C , donde la pendiente disminuye con la T_H . Se caracterizaron las poblaciones como función de T_H y T_C , donde si la discordia afecta el aumento de una de las poblaciones implica que lo hace en la disminución de otro de los estados. Se tiene también que para las energías con valor cero, la discordia (en función de T_H y T_C) presenta un máximo local, lo que implica que la discordia juega un papel importante en el flujo de corriente de calor y en el cambio en las poblaciones.

Palabras clave: Termodinámica cuántica, Discordia, Correlaciones Cuánticas

Abstract of the thesis presented by **Tarek Alfredo Naime Jorge** as a partial requirement to obtain the Master of Science degree in Material Physics

Quantum correlations and their relationship with the efficiency on thermal engines based on quantum dots

Abstract approved by:

Dr. Fernando Rojas Iñíguez
Thesis Director

In this thesis nonclassical properties of a thermal engines consisting of an array of four quantum dots with up to two electrons, is studied. Coulomb interaction between electrons in the quantum dots is considered, as well as vertical tunneling and coupling of the quantum dots to fermionic heat reservoirs, which are at different temperature. Quantum states and characteristic functions are determined for closed system (without reservoir coupling) for one and two electrons as a function of tunneling. The master markovian equations for the density matrix of an open quantum system (with reservoir coupling) are obtained and from these equations the density matrix in equilibrium is determined for a system with zero, one and two electrons. We study the relationships between populations, the heat flux, average energy and quantum correlations (discord and concurrence) as a function of the hot (T_H) and cold (T_C) temperatures. The thermal engine was analyzed in two situations: equal site energies (with a value of zero) and different site energies. The results for quantum correlations as function of temperature variations (T_H and T_C) show that the concurrence (separability of states) is a marginal property of the system, and the discord is the dominant correlation for the process of heat flow, and populations dynamics. The heat currents by site show a linear behavior with the discord parametrically with T_C , where the slope decreases with T_H . The populations were characterized as function of T_H and T_C , we find that, due to discord, the population of one state increases while that of another state decreases. Other result show that the zero value energies the discord has a local maximum value (as function of T_H and T_C). This implies that the discord plays an important role in the current flow of heat and the change in populations.

Keywords: Discord, Quantum thermodynamics, Quantum Correlations

Dedicatoria

A mi familia por su apoyo incondicional

Agradecimientos

Quiero agradecer a:

Al Dr. Fernando Rojas por recibirme como tesista, por su paciencia, disposición consejos y confianza otorgada.

Mis padres Anuar y Gabriela, por estar en ahí en todo momento, y creer en mí.

A mis hermanas Laila y Fanny, por sus pláticas y motivación.

A los miembros de mi comité de tesis, por darse el tiempo de revisar y evaluar mi progreso.

A mis compañeros y amigos, por ser siempre estar ahí, en las buenas y en las malas

Al Centro de Nanociencias y Nanotecnología y al Centro de Educación Científica y de Educación Superior de Ensenada por permitir desarrollar mi trabajo de tesis dentro de sus instalaciones.

Al CONACyT por el apoyo económico recibido mediante la beca.

Tabla de contenido

	Página
Resumen en español.....	ii
Resumen en inglés.....	iii
Dedicatorias.....	iv
Agradecimientos.....	v
Lista de figuras.....	viii
Lista de tablas.....	xiii
 Capítulo 1. Introducción	 1
1.1 Antecedentes.....	1
1.1.1 Termodinámica cuántica.....	1
1.1.2 Máquina térmica autocontenida.....	3
1.1.3 Correlaciones cuánticas.....	4
1.2 Hipótesis.....	5
1.3 Objetivos.....	5
1.3.1 Objetivo general.....	5
1.3.2 Objetivos específicos.....	6
 Capítulo 2. Dinámica de sistemas abiertos	 7
2.1 Sistemas cuánticos abiertos.....	7
2.1.1 Matriz de densidad.....	9
2.1.2 Ecuación maestra Markoviana.....	10
2.1.3 Aproximación secular.....	11
 Capítulo 3. Modelo de cuatro puntos cuánticos	 13
3.1 Descripción del modelo.....	13
 Capítulo 4. Sistema cerrado	 16
4.1 Con un electrón dentro del sistema.....	16
4.2 Sistema cerrado con dos electrones dentro del sistema.....	22
 Capítulo 5. Sistema cuántico abierto en condición de equilibrio	 28
5.1 Proceso de entrada de un electrón.....	29

5.2 Transición de uno a dos electrones	34
5.2.1 Cambio de base.....	38
Capítulo 6. Correlaciones cuánticas y corriente de calor	39
6.1 Concurrencia.....	39
6.2 Discordia.....	41
6.3 Energía promedio.....	44
6.4 Corriente de calor.....	44
Capítulo 7. Resultados	47
7.1 Solución al sistema (temperaturas iguales).....	47
7.1.1 Poblaciones (probabilidad de ocupación).....	50
7.1.2 Correlaciones: Concurrencia y discordia.....	51
7.2 Máquina térmica con tres temperaturas.....	52
7.2.1 Resumen de resultados importantes.....	53
7.2.2 Energías de sitio distintas.....	54
7.2.3 Corrientes de calor por sitio.....	62
7.2.4 Energías de sitio iguales	69
7.2.5 Energía promedio.....	78
Capítulo 8. Conclusiones y trabajo a futuro	83
Literatura citada.....	85
Apéndice A. Descripción de la matriz de densidad en un sistema abierto.....	86
Apéndice B Transiciones W_{sr}.....	93
Apéndice C Probabilidad de ocupación de un electrón	96

Lista de figuras

Figura	Página
1. Sistema abierto 1 y baño como partes de un sistema cerrado.....	8
2. Esquematización de un sistema cuántico abierto (S-E) donde el ambiente es etiquetado como E y el sistema se etiqueta como S.....	9
3. Diagrama del modelo de cuatro puntos cuánticos (Venturelli D. 2013) para la máquina térmica.....	13
4. Se muestran los cuatro eigenvalores del Hamiltoniano del sistema cerrado con un electrón.	19
5. Probabilidad de ocupación por sitio del primer estado como función del tuneleo, a) el estado $ a_1^1\rangle$, b) el estado $ a_2^1\rangle$, c) el estado $ a_3^1\rangle$, d) el estado $ a_4^1\rangle$, para el primer estado. Se observa como es mayor la probabilidad de ocupación para el segundo punto cuántico $ a_2^1\rangle$ para el primer estado.....	20
6. Probabilidad de ocupación por sitio del segundo estado como función del tuneleo, a) el estado $ a_1^1\rangle$, b) el estado $ a_2^1\rangle$, c) el estado $ a_3^1\rangle$, d) el estado $ a_4^1\rangle$. Se observa como es mayor la probabilidad de ocupación para el tercer punto cuántico $ a_3^1\rangle$ para el primer estado.	21
7. Probabilidad de ocupación por sitio del tercer estado como función del tuneleo, a) el estado $ a_1^1\rangle$, b) el estado $ a_2^1\rangle$, c) el estado $ a_3^1\rangle$, d) el estado $ a_4^1\rangle$. Se observa como es mayor la probabilidad de ocupación en el primer punto cuántico para el tercer estado.....	21
8. Probabilidad de ocupación por sitio del cuarto estado como función del tuneleo, a) el estado $ a_1^1\rangle$, b) el estado $ a_2^1\rangle$, c) el estado $ a_3^1\rangle$, d) el estado $ a_4^1\rangle$. Se observa como es mayor la probabilidad de ocupación en el cuarto punto cuántico para el cuarto estado.....	22
9. Se muestra la dependencia de los eigenvalores contra el efecto túnel “t” en el sistema de dos electrones.	24
10. La probabilidad de ocupación de los estados de dos partículas como función del tuneleo. a) el estado $ a_1^2\rangle$, b) el estado $ a_2^2\rangle$, c) el estado $ a_3^2\rangle$ y d) es el estado $ a_4^2\rangle$. La probabilidad es el estar en el estado cuántico c) y d) es la misma, mientras que para los dos primeros estados de número es cero.....	25
11. Se muestra la probabilidad de ocupación de los estados de dos partículas como función del tuneleo. a) el estado $ a_1^2\rangle$, b) el estado $ a_2^2\rangle$, c) el estado $ a_3^2\rangle$ y d) es el estado $ a_4^2\rangle$. La probabilidad varía con respecto al tunelamiento y que la probabilidad de ocupación está dada con mayor probabilidad al QD1 y QD2.....	26

12.	Se muestra la probabilidad de ocupación de los estados de dos partículas como función del tuneleo. a) el estado $ a_1^2\rangle$, b) el estado $ a_2^2\rangle$, c) el estado $ a_3^2\rangle$ y d) es el estado $ a_4^2\rangle$. Para el tercer estado observamos que la mayor probabilidad de ocupación existe para los estados c) y d).	26
13.	Se muestra la probabilidad de ocupación de los estados de dos partículas como función del tuneleo. a) el estado $ a_1^2\rangle$, b) el estado $ a_2^2\rangle$, c) el estado $ a_3^2\rangle$ y d) es el estado $ a_4^2\rangle$. Este estado tenemos que la mayor probabilidad de ocupación es para el estado $ a_1^2\rangle$	27
14.	Esquema del sistema del arreglo de puntos cuánticos acoplados, incluyendo la interacción con los reservorios fermiónicos a temperaturas; T_C , T_H y T_R (Venturelli D. 2013).	38
15.	Entropías de un sistema bipartito.....	41
16.	Probabilidad de no tener electrones en el sistema como función de temperatura se observa como es el cambio en ausencia de electrones cuando la temperatura varía de la misma manera en los cuatro reservorios.....	48
17.	Soluciones de la matriz de densidad de un electrón como función de la temperatura para a) estado $ a_2^1\rangle$, b) estado $ a_2^1\rangle$, c) estado $ a_3^1\rangle$ y d) para el estado $ a_4^1\rangle$	49
18.	Soluciones de la matriz de densidad de dos electrones como función de la temperatura a) para estado $ a_2^1\rangle$, b) para el estado $ a_2^1\rangle$, c) estado $ a_3^1\rangle$ d) para el estado $ a_4^1\rangle$	49
19.	Se grafican las probabilidades de ocupación de la matriz de densidad de dos electrones.	50
20.	La concurrencia como función de la temperatura.....	51
21.	Discordia cuántica contra la temperatura.....	52
22.	Discordia cuántica como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha).....	55
23.	Concurrencia en función de la temperatura fría y caliente.	55
24.	Probabilidad de ocupación de QD1 y QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(2)}$	56
25.	Probabilidad de ocupación de QD1 y QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(2)}$	57
26.	Probabilidad de ocupación de QD2 y QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el tercer estado de $\rho^{(2)}$	57
27.	Probabilidad de ocupación de QD3 y QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el cuarto estado de $\rho^{(2)}$	58

28.	Probabilidad de ocupación para el primer estado QD1 y QD2 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H	59
29.	Probabilidad de ocupación para el segundo estado QD1 y QD3 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H	60
30.	Probabilidad de ocupación para el segundo estado QD2 y QD4 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H	60
31.	Probabilidad de ocupación para el primer estado QD1 Y QD2 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_H para diferentes valores de T_C	61
32.	Probabilidad de ocupación para el segundo estado QD1 Y QD3 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_H para diferentes valores de T_C	61
33.	Probabilidad de ocupación para el segundo estado QD2 Y QD4 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_H para diferentes valores de T_C	62
34.	Corriente de calor para el sitio QD1 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	63
35.	Corriente de calor para el sitio QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	63
36.	Corriente de calor para el sitio QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	64
37.	Corriente de calor para el sitio QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	65
38.	Discordia cuántica como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	69
39.	Probabilidad de ocupación en QD1 y QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(2)}$	70
40.	Probabilidad de ocupación QD1 y QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el segundo estado de $\rho^{(2)}$	71
41.	Probabilidad de ocupación de QD2 y QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el tercer estado de $\rho^{(2)}$	71
42.	Probabilidad de ocupación de QD3 y QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el cuarto estado de $\rho^{(2)}$	72
43.	Probabilidad de ocupación para los cuatro estados de la matriz de densidad de dos estados $\rho^{(2)}$ paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H	73
44.	Corriente de calor para el sitio QD1 como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	74

45.	Corriente de calor para el sitio QD2 como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	75
46.	Corriente de calor para el sitio QD3 como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	75
47.	Corriente de calor para el sitio QD4 como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	76
48.	Energía promedio como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha).....	78
49.	Energía promedio como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H	79
50.	Energía promedio como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_H para diferentes valores de T_C	79
51.	Energía promedio como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	80
52.	Energía promedio como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H	81
53.	Energía promedio como función de la discordia a) y paramétrica con T_H b) para diferentes valores de T_C	81
54.	Probabilidad de ocupación de no tener electrones como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	96
55.	Probabilidad de ocupación QD1 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(1)}$	97
56.	Probabilidad de ocupación QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el segundo estado de $\rho^{(1)}$	97
57.	Probabilidad de ocupación QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el tercer estado de $\rho^{(1)}$	98
58.	Probabilidad de ocupación QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el cuarto estado de $\rho^{(1)}$	99
59.	Probabilidad de ocupación de no tener electrones como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)	100
60.	Probabilidad de ocupación de QD1 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(1)}$	100
61.	Probabilidad de ocupación QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el segundo estado de $\rho^{(1)}$	101

62.	Probabilidad de ocupación QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el tercer estado de $\rho^{(1)}$	102
63.	Probabilidad de ocupación del QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el cuarto estado de $\rho^{(1)}$	102

Lista de tablas

Tabla		Página
1	Corrientes de sitio J_{QDi} en función de la discordia parametrizadas con la temperatura T_C . sitio 1 primer renglón, sitio dos el segundo renglón, sitio tres el tercer renglón y sitio 4 el cuarto renglón. Para temperaturas específicas de T_H	66
2	Corrientes de sitio J_{QDi} en función de la discordia parametrizadas con la temperatura T_H . Sitio 1, primer renglón, sitio dos el segundo renglón, sitio 3 tercer renglón y sitio 4 cuarto renglón para varias temperaturas T_C	68
3	Corrientes de sitio en función de la discordia parametrizadas con la temperatura T_C	77

Capítulo 1. Introducción

1.1 Antecedentes

La termodinámica nos presenta una imagen eficaz de los procesos que ocurren en los sistemas complejos, describiendo las propiedades generales del sistema sin preocuparse en los detalles microscópicos. Cantidades tales como la temperatura de un sistema, la cantidad de trabajo que se puede extraer de ella, o el calor que se disipa, reducen la descripción de sistemas que comprenden un número incalculable de partículas a un puñado de parámetros. Como consecuencia de esta "vista general", la termodinámica es ampliamente aplicable, y sus leyes parecen ser obedecidas por todos los procesos que ocurren en el mundo macroscópico.

La desventaja de esta descripción macroscópica es que la termodinámica necesariamente se ocupa de cantidades promedio. A pesar de ser un enfoque válido cuando el sistema en cuestión se compone de un número macroscópico de partículas, ésta comienza a perder precisión a medida que disminuye el tamaño del sistema y las fluctuaciones entorno a estas cantidades promedio, debido al movimiento térmico, sean relevantes. La termodinámica estocástica comienza cuando la descripción macroscópica empieza a fallar, y da una visión más profunda de las fluctuaciones de las magnitudes termodinámicas. También se mueve más allá de las situaciones de equilibrio asociada con la termodinámica, y puede describir el comportamiento de los sistemas que se mantienen fuera del equilibrio [Udo Seifert, 2012]. Estas consideraciones son de vital importancia si se consideran sistemas a escala nanométrica o máquinas biológicas.

1.1.1. Termodinámica cuántica

La termodinámica cuántica es la ciencia que estudia aquellos procesos termodinámicos que se encuentran dentro del contexto de la dinámica cuántica.

Esta ciencia se dedica a desentrañar la íntima conexión entre las leyes de la termodinámica estadística y su origen cuántico. Durante muchas décadas, la termodinámica y la dinámica cuántica fueron desarrolladas de una manera independiente. Una excepción es el estudio de Scovil et al., que en 1959

demostró la equivalencia de la máquina de Carnot [Carnot, 1824] con los tres niveles maser. La diferencia conceptual principal entre los 3 niveles de máser y las máquinas térmicas convencionales es que en el máser uno está preocupado por los niveles de energía discretos de una partícula con energía continua mientras que en una máquina térmica convencional se refiere al espectro continuo de energías asociada con el movimiento externo, preparando el escenario para nuevos desarrollos en esta nueva área de investigación.

Para poder relacionar la termodinámica estadística y la dinámica cuántica, las cuales tienen puntos de partida diferentes, debemos enfocarnos en la dinámica de la materia y en la materia misma. Hablando en el ámbito de la termodinámica, la dinámica cuántica microscópica nunca ha estado presente en la descripción de los fenómenos ya que la teoría estándar se concentra en sistemas cerca del equilibrio. Esta ausencia de la dinámica es la que provoca que la mecánica cuántica se utilice como un puente para reintroducir los procesos dinámicos a la termodinámica; en particular la teoría cuántica de sistemas abiertos que se encuentran embebidos en un baño térmico. Las ecuaciones maestras Markovianas utilizadas por primera vez por Lindblad y Gorini-Kossakowski-Sudarshan (generador LGKS) en 1976, funcionan como elementos clave de la termodinámica cuántica.

Las investigaciones en la emergente disciplina de la termodinámica cuántica, abarcan en su estudio una variedad de procesos termodinámicos a escalas nanométricas. En general lo que se busca entender es si los efectos puramente cuánticos tienen un reflejo o una variable observable en el medio macroscópico.

Para lograr el enlace entre la termodinámica y la mecánica cuántica se requiere del uso de la matriz de densidad como la herramienta de descripción para poder hacer los cálculos y mediciones de las variables (observables o medibles) tales como la entropía de Von Neumann, la cual nos da la información del grado de mezcla que tiene el sistema, entre otras.

Uno de los ejemplos tradicionales de la termodinámica cuántica es la máquina de Carnot [Alick, 1979]. Esta da pie para poder generalizar la primera y segunda ley de la termodinámica bajo el esquema de la termodinámica cuántica. Otros ejemplos son los modelos de refrigeradores y máquinas de calor las cuales requieren de la termodinámica cuántica para poder ser descritos a una escala nanométrica.

Las leyes de la termodinámica en el contexto de la dinámica cuántica se traducen de la siguiente manera [Kosloff, 1984]:

Ley cero: Se ocupa de la partición del sistema con el baño

Primera ley: Establece la conservación de la energía

Segunda ley: Establece la irreversibilidad de la dinámica

Tercera ley: La definición dinámica, establece el principio de inaccesibilidad: es imposible de cualquier manera, no importa que tan ideal sea la situación, reducir cualquier ensemble al cero absoluto en un número finito de operaciones.

1.1.2. Máquina térmica autocontenida

Los primeros autores [Linden, N., Popescu, S., Skrzypczyk, P., 2010] en hacer una descripción y un intento de ver cuál es el límite de las máquinas térmicas autocontenidas (en la cual no es requerida una fuente externa de trabajo) utilizando qubits (es la unidad de la computación cuántica), y mostrar hasta que temperatura se podría llegar a enfriar esta máquina térmica (ellos demuestran que es posible enfriar hasta el cero absoluto). Este modelo se basa en un sistema de tres qubits, donde dos de ellos tienen la función del refrigerador y el otro qubit es el objeto a enfriar [Linden, N., Popescu, S., Skrzypczyk, P., 2010], y a partir de las interacciones de los qubits con los baños térmicos logran obtener resultados concretos, el problema con este modelo es el hecho de tener un sistema de tres cuerpos.

Después vienen otros autores Davide Venturelli, Rosario Fazio, and Vittorio Giovannetti en 2003 e investigan el mismo problema, pero con otro sistema físico, en el cual se hace un arreglo en un sistema con cuatro puntos cuánticos en una configuración cuadrada (cada punto es una de las esquinas del cuadrado), que se encuentran en contacto con reservorios térmicos (cada reservorio de manera independiente a cada punto cuántico). Ellos logran un mayor impacto en los resultados obtenidos y una posibilidad para un futuro desarrollo.

1.1.3. Correlaciones cuánticas

Una interacción física entre dos sistemas cuánticos introduce, en general, correlaciones cuánticas entre ellos. Cuando existen estas correlaciones, el estado de uno de los sistemas depende de mediciones llevadas a cabo en el otro, incluso si al momento de la medición los sistemas están alejados y ya no interaccionan. Las correlaciones cuánticas se manifiestan como un recurso completamente distinto a los usados en la teoría de información clásica y por ello es posible implementar protocolos novedosos. Las correlaciones cuánticas tienen un papel fundamental en el procesamiento de información cuántica y en los protocolos para implementar computación cuántica. Dentro de las formas en que se presentan las correlaciones cuánticas, el entrelazamiento es el tipo de correlación cuántica más estudiada y mejor comprendida.

La discordia cuántica, es otra correlación más general que proporciona la no clasicidad de los estados y se puede entender como la información conjunta que queda en un sistema después de perturbarlo mediante la observación y extraerle toda la información clásica a uno de los subsistemas. Hay un creciente interés en este tipo de correlaciones cuánticas en áreas como la información cuántica, algoritmos cuánticos, termodinámica cuántica, dinámica de sistemas abiertos y física de muchos cuerpos. El interés se debe a que la discordia cuántica es una correlación, más robusta y menos costosa en comparación con el entrelazamiento, que funciona como recurso en la realización de procesos físicos y procesamiento de información cuántica y está basada en la entropía mutua

Otra forma de entender las correlaciones es de la siguiente manera, una interacción entre los subsistemas 1 y 2, introduce, en general, correlaciones entre ellos. Cuando existen estas correlaciones, el estado del subsistema 2 depende de mediciones llevadas a cabo en el subsistema 1, incluso si el subsistema 2, al momento de la medición, ya está muy lejos del subsistema uno y ya no interactúa con él. De esta forma aparecen correlaciones entre los resultados de mediciones realizadas en un subsistema y los de mediciones en el otro.

Existen correlaciones cuánticas que no están relacionadas con la no separabilidad de los estados (entrelazamiento); estas correlaciones son la discordia cuántica y otras medidas relacionadas con ella. Hay un creciente interés en este otro tipo de correlaciones cuánticas en áreas como la información cuántica, algoritmos cuánticos, termodinámica cuántica, dinámica de sistemas abiertos y física de muchos cuerpos. El interés se debe a que, por ejemplo, en el área de computación cuántica, la discordia es un recurso que funciona en un ambiente más ruidoso y desordenado que el requerido por estados entrelazados. Además

del entrelazamiento, las medidas más populares que se usan para cuantificar las correlaciones cuánticas es esta propiedad de discordia cuántica, el déficit cuántico, el disturbio inducido por la medición y la entropía relativa de la discordia.

Cuando se discute sobre transmisión de información cuántica se enfatiza que las operaciones a las que se hace referencia son procedimientos experimentales donde dos personas intercambian información mandándose estados cuánticos. Y es en este contexto que se puede cuantificar la ignorancia promedio de un sistema cuántico. La ignorancia promedio asociada a un estado cuántico se mide con la entropía de von Neumann. El negativo de esta entropía se interpreta como la cantidad de información de un sistema. Se está interesado en cuantificar las correlaciones entre dos sistemas y esto se hace en función de la información asociada al sistema compuesto y a la información de los dos subsistemas que lo forman. Dos sistemas están correlacionados si en conjunto contienen más información que tomados por separado. La información mutua es la información del sistema compuesto menos la información de los sistemas individuales: la información mutua cuantifica todas las correlaciones existentes. La información clásica se interpreta como la información que gana un subsistema como resultado de una medición proyectiva obtenida en uno de los subsistemas. Hay una información clásica para cada medición proyectiva. Para que no haya equívocos siempre se escoge el máximo de entre el conjunto de informaciones clásicas. La discordia cuántica es la diferencia entre el total de correlaciones, dado por la información mutua, y las correlaciones clásicas, dadas por el máximo de las informaciones clásicas. [Gemmer J., et al., 2009]

1.2 Hipótesis

En un en una máquina térmica basada en puntos cuánticos, el flujo de calor por sitio está relacionado con las correlaciones cuánticas (discordia) inducidas térmicamente.

1.3 Objetivos

En este trabajo nos planteamos los siguientes objetivos.

1.3.1 Objetivo general

Calcular las correlaciones cuánticas en una máquina térmica de cuatro puntos cuánticos y establecer relaciones con el flujo de calor.

Para lograrlos planeamos desarrollar los siguientes objetivos específicos:

1.3.2. Objetivos específicos

1. Determinar los estados y funciones características de arreglo de puntos cuántico cerrado para uno y dos electrones como función del tuneo
2. Obtener las ecuaciones maestras de este sistema para el sistema acoplado a los reservorios y obtener la matriz de densidad en equilibrio con 1 y 2 electrones en el sistema.
3. Determinar la corriente de calor, las probabilidades de ocupación de estados de 1 y 2 electrones, la energía, y las correlaciones cuánticas (discordia y concurrencia como medida de entrelazamiento)
4. A partir de la determinación de estas propiedades poder establecer la posible la relación que existe entre ellas y las correlaciones cuánticas.

Capítulo 2. Dinámica de sistemas abiertos

2.1. Sistemas Cuánticos Abiertos

En el desarrollo de la teoría cuántica, los pioneros en este campo se concentran en los sistemas simples, como el oscilador armónico o el átomo de hidrógeno suponiendo que sean aislados del resto del universo. La dinámica de tales sistemas cuánticos aislados son completamente descritos por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para la función de onda $\Psi(x, t)$. En este tipo de modelos nunca se va a lograr dar una descripción completa de la situación física real, el aislamiento implica idealización. [Gremmer, et al., 2009]

El enfoque del sistema cuántico abierto se basa en el hecho de que cualquier descripción de un sistema real será necesariamente incompleto. Esto significa que el subsistema seleccionado para el estudio eventualmente va a estar sujeto a la interacción con algo no observable y, en gran medida a un incontrollable "medio ambiente". Estas incrustaciones del sistema prevalecen, esto es que no sólo limitan el acceso a la información, sino también cambian drásticamente la dinámica del sistema.

En términos generales, un sistema abierto es un sistema cuántico **S** que está acoplado a otro sistema cuántico **B** llamado el medio ambiente o baño. Por lo tanto, se representa un sistema total **S+B**, con lo que en la mayoría de los casos se supone que el sistema combinado se cierra, siguiendo la dinámica Hamiltoniana. El estado del subsistema S, sin embargo, va a cambiar como consecuencia de su dinámica interna y de la interacción con el ambiente, dicha interacción va a dar lugar a ciertas correlaciones, de tal manera que los resultantes cambios de estado de S ya no pueden, en general, ser representados en términos de dinámica Hamiltoniana. La dinámica del subsistema S inducida por la evolución del Hamiltoniano del sistema total se refiere a menudo como la dinámica del sistema reducido, y el sistema S también se suele llamar el sistema reducido.

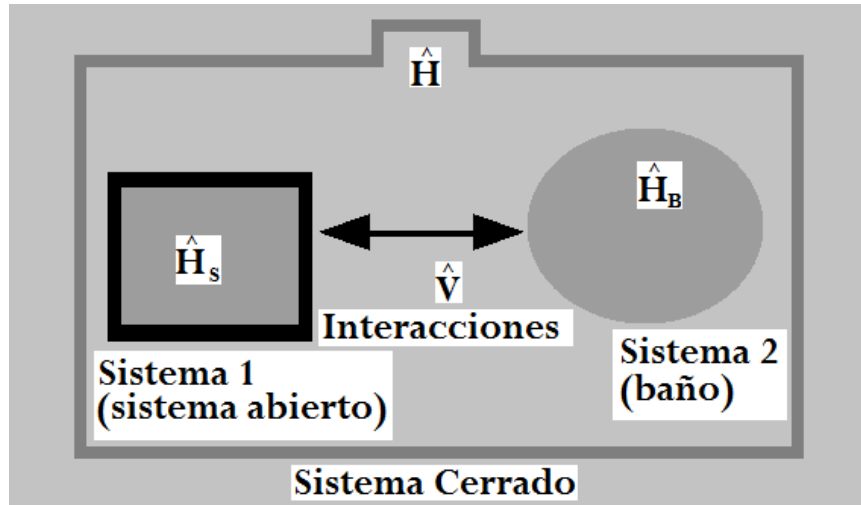


Figura 1 Sistema abierto 1 y baño como partes de un sistema cerrado

Si denotamos $\mathcal{H}_S$ al espacio de Hilbert del sistema S y $\mathcal{H}_b$ al espacio de Hilbert del baño (o ambiente) B , el espacio de Hilbert total, será el sistema total $S + B$ y está dado por el producto tensorial de ambos espacios $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_b$. El Hamiltoniano $H(t)$ total será de la forma

$$H(t) = H_S \otimes I_B + I_S \otimes H_B, \quad (1)$$

Donde podemos observar que H_S es el Hamiltoniano del sistema (S), H_B es el Hamiltoniano del ambiente (B), I_S y I_B son operadores identidad del sistema y el baño respectivamente. Por último $H(t)$ es el Hamiltoniano que va a describir la interacción entre el sistema y el baño. La figura 2 es una referencia esquemáticamente de la definición de un sistema cuántico abierto.

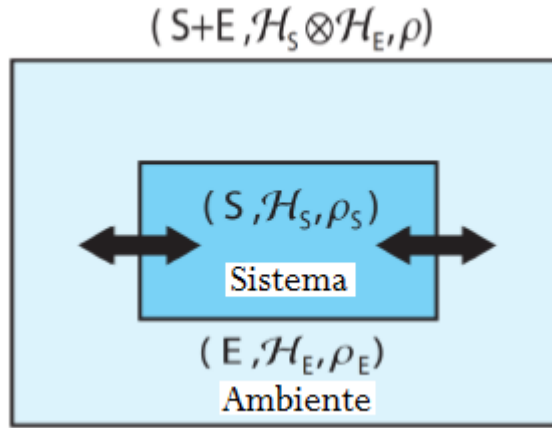


Figura 2 Esquemización de un sistema cuántico abierto (S-E) donde el ambiente es etiquetado como E y el sistema se etiqueta como S

2.1.1. Matriz de densidad

El operador de densidad o matriz de densidad es una representación alternativa del estado de un sistema cuántico. Aunque la descripción de un sistema cuántico con la matriz densidad es equivalente a usar la función de onda, con la matriz de densidad se tienen ventajas prácticas para ciertos problemas dependientes del tiempo; en particular la relajación y la espectroscopia no lineal en la fase condensada.

La forma más general para definir el estado de un sistema cuántico es por su matriz de densidad ρ_{ij} , que especifica la representación del operador densidad,

$$\hat{\rho} = \sum_{i,j} \hat{P}_{ij} \rho_{ij}, \quad (2)$$

donde $\hat{P}_{ij}$ la probabilidad y ρ_{ij} son los elementos matriciales de $\hat{\rho}$. La matriz de densidad se encuentra sujeta a la condición siguiente,

$$Tr\{\hat{\rho}\} = \sum_i \rho_{ii} = 1. \quad (3)$$

Esta propiedad es la condición de normalización (la traza de la matriz de densidad es igual a uno).

Otra propiedad de la matriz de densidad es que sus elementos $\rho_{ij} = \langle i|\hat{\rho}|j\rangle$ son positivos definidos y representan una matriz de Hermitiana.

El valor esperado de una observable arbitraria $\hat{A}$ en el estado representado por la matriz de densidad $\hat{\rho}$ estará dado por

$$\langle A \rangle = Tr\{\hat{\rho} \hat{A}\} = \sum_{i,j} A_{ji} \rho_{ij}. \quad (4)$$

2.1.2. Ecuación maestra Markoviana [Gemmer J., et al., 2009]

Esta ecuación es derivada de una ecuación irreversible la cual es local en el tiempo para la matriz de densidad reducida.

Se tiene que los efectos de memoria del medio ambiente son despreciables. Esto quiere decir que las funciones de autocorrelación del medio ambiente, que se crean por el acoplamiento al sistema, decaen rápidamente en comparación con los tiempos en que el sistema cambia en forma significativa. En mapas dinámicos, esta aproximación se describe de la forma,

$$V_{t1} V_{t2} = V_{t1+t2}. \quad (5)$$

La forma más general del mapa dinámico que satisface la condición anterior es

$$V(t) = \exp(\mathcal{L} t), \quad (6)$$

donde el generador $\mathcal{L}$ es un mapa lineal. A partir de la ecuación anterior se puede escribir una ecuación diferencial para la matriz de densidad reducida (ρ_s),

$$\frac{d}{dt} \rho_s(t) = \mathcal{L} \rho_s(t). \quad (7)$$

Utilizando la aproximación de Born, la cual consiste en dos aspectos: primero el acoplamiento entre el sistema y el baño es suficientemente débil. Y en segundo, el baño es suficientemente grande de tal manera que en cada momento el estado cuántico es un estado producto,

$$\rho = \rho_s \otimes \rho_b, \quad (8)$$

donde la matriz ρ_b no cambia.

Haciendo uso de esta aproximación en la ecuación para la matriz de densidad (7) se reescribe de la siguiente manera

$$\mathcal{L} \rho_s = \frac{d}{dt} \rho_s = i[H_s, \rho_s]. \quad (9)$$

2.1.3. Aproximación secular

Esta aproximación implica descartar términos de oscilaciones rápidas en la ecuación maestra Markoviana, por lo tanto, se parece a la aproximación de onda-rotante que se usa en óptica cuántica. No se aplica la aproximación de onda rotante en un sistema con interacción como el nuestro sistema ya que esto llega a provocar problemas como la incorrecta renormalización del Hamiltoniano.

En los próximos capítulos detallamos la derivación de la ecuación maestra para el modelo bajo estudio de un arreglo de cuatro puntos cuánticos donde pueden entrar al sistema uno dos electrones de reservorios fermiónicos a tres temperaturas T_C , T_H y T_R .

Capítulo 3. Modelo de cuatro puntos cuánticos

3.1. Descripción del Modelo

El primer autor en hacer una descripción y un intento de ver cuál es el límite de las máquinas térmicas autocontenidas fue Davide Venturelli en 2013, Él requirió el uso de los qubits para poder expresar el modelo cuántico, y a partir de esto pudo ver que la temperatura cambiaba y se podría llegar a enfriar (posiblemente enfriar hasta el cero absoluto).

El problema con este modelo es que el hecho de tener un sistema de tres cuerpos como lo propone sería muy complejo desarrollarlo en la práctica. Ya que la ingeniería actualmente no puede tener la interacción de los tres cuerpos, donde se permita la transición entre un estado doblemente excitado en contacto a un reservorio frío y a uno caliente con un estado acoplado excitado que se encuentra a una temperatura intermedia es fundamental para realizarlo en la práctica

Después en otro trabajo presentan el planteamiento al mismo problema, pero con otro arreglo físico. Este lo forman con cuatro puntos cuánticos en una configuración cuadrada, en contacto con reservorios térmicos, logrando un mayor impacto en los resultados obtenidos y mejor viabilidad para un futuro desarrollo como máquina térmica.

Este sistema o modelo se presenta en la figura 3, donde se tienen cuatro puntos cuánticos y la interacción entre ellos. Existe interacción coulombiana entre todos ellos (cuando se tienen dos electrones dentro del sistema), pero además se establece que solo existirá tuneo de manera paralela (esto es con los puntos 1-4 y 2-3). Además de estar interaccionando cada uno de los puntos con reservorio (cada reservorio es independiente de los otros).

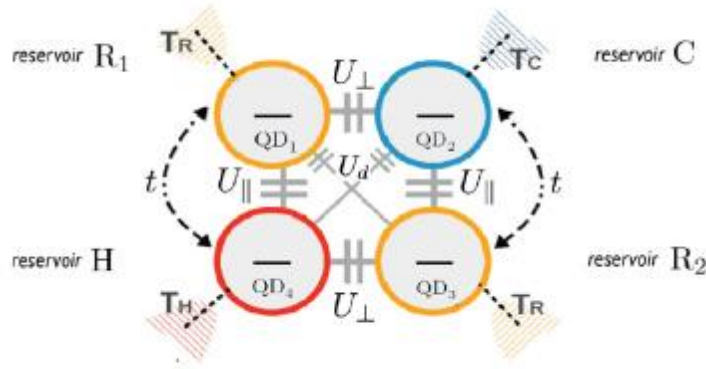


Figura 3 Diagrama del modelo de cuatro puntos cuánticos (Venturelli D. 2013) para la máquina térmica.

El modelo que estudiamos en este trabajo se basa en un sistema de cuatro puntos cuánticos fermiónicos etiquetados como QD_1 , QD_2 , QD_3 y QD_4 , en donde tenemos potenciales de interacción coulombiana entre los puntos cuánticos de la siguiente forma:

El potencial coulombiano perpendicular ($U_{\perp}$ o U_p) entre QD_1 y QD_2 y QD_4 y QD_3 .

Un potencial coulombiano paralelo ($U_{\parallel}$) entre QD_1 y QD_4 y QD_2 y QD_3 .

Y un potencial coulombiano diagonal (U_d) entre QD_1 y QD_3 y QD_2 y QD_4 .

Otra característica del modelo es que solo se permite el paso de los electrones de un punto a otro por efecto túnel. Y solo entre los puntos cuánticos QD_1 y QD_4 y los puntos cuánticos QD_2 y QD_3 .

Los reservorios son de tipo fermiónico, y éstos son los que van a generar las entradas y salidas al sistema, dependiendo como se encuentre el sistema.

Los reservorios están etiquetados de la siguiente manera:

El reservorio etiquetado como R_1 es aquel que está unido al punto cuántico QD_1 y tiene una temperatura que llamaremos de referencia (T_{R1})

El reservorio etiquetado como H es aquel que tiene la temperatura más alta del sistema (T_H) y está unido al punto cuántico QD_4

El reservorio etiquetado como R_2 es aquel que está unido al punto cuántico QD_3 y tiene una temperatura que llamaremos de referencia (T_{R2})

El reservorio etiquetado como C es aquel que tiene la temperatura “fría” T_C , o aquella temperatura menor a las otras dos.

Este será el modelo a estudiar en el sistema cerrado (sin reservorios) para el caso de uno y dos electrones en el sistema. Para posteriormente deducir la ecuación maestra y ponerla en equilibrio en el sistema abierto acoplado a los reservorios a las diferentes temperaturas.

Capítulo 4. Sistema cerrado.

El sistema cerrado se caracteriza por la ausencia de ambiente o reservorios fermiónicos en el modelo, es decir no existe el Hamiltoniano del baño ni un Hamiltoniano de interacción. Es el caso más sencillo de resolver, además de poder observar cómo se van comportando las energías y ocupaciones antes de hacer el análisis del sistema cuántico abierto.

4.1. Con un electrón dentro del sistema.

En esta sección se analiza el modelo cuando en el sistema solo se encuentra un electrón dentro.

Primero se tiene que tiene la base de sitio, la que se utilizó para este sistema es la siguiente:

$$|v\rangle = |n_1 \ n_2 \ n_3 \ n_4\rangle, \quad (1)$$

donde n_i se define como la ocupación del sitio i , y solo puede ser cero o uno (esto implica ausencia o presencia del electrón), dándonos solo las siguientes cuatro posibilidades:

$$|a_1^1\rangle = |1 \ 0 \ 0 \ 0\rangle, |a_2^1\rangle = |0 \ 1 \ 0 \ 0\rangle, |a_3^1\rangle = |0 \ 0 \ 1 \ 0\rangle \text{ y } |a_4^1\rangle = |0 \ 0 \ 0 \ 1\rangle.. \quad (2)$$

El Hamiltoniano que describe este sistema es:

$$\hat{H}(S) = \sum_{i=1}^4 \epsilon_i c_i^\dagger c_i - t [c_1^\dagger c_4 + c_4^\dagger c_1 + c_2^\dagger c_3 + c_3^\dagger c_2], \quad (3)$$

donde ϵ_i son las energías para cada uno de los sitios, t es la probabilidad de tuneo entre los puntos cuánticos y los operadores $c_i^\dagger$ y c_i son los operadores de creación y aniquilación de un electrón en el i -ésimo sitio, respectivamente.

Si utilizamos la base de sitio (ecuación 2), la forma matricial del Hamiltoniano se expresa de la siguiente manera:

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 & -t \\ 0 & \epsilon_2 & -t & 0 \\ 0 & -t & \epsilon_3 & 0 \\ -t & 0 & 0 & \epsilon_4 \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Renombrando los términos y reacomodándolos, como dos sistemas de dos estados separados, obtenemos:

$$\hat{H}(S) = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{14} & 0 & 0 \\ H_{41} & H_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{22} & H_{23} \\ 0 & 0 & H_{32} & H_{33} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Con el Hamiltoniano escrito de esta manera podemos obtener las energías (eigenvalores) y los eigenvectores. diagonalizando esta matriz hermitiana las energías nos quedan de la siguiente manera:

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{44}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11} - H_{44})^2 + 4|H_{14}|^2} = \frac{1}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_4) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_1 - \epsilon_4)^2 + 4t^2} \quad (6)$$

$$E_{3,4} = \frac{1}{2}(H_{22} + H_{33}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{22} - H_{33})^2 + 4|H_{23}|^2} = \frac{1}{2}(\epsilon_2 + \epsilon_3) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_2 - \epsilon_3)^2 + 4t^2}.$$

También se obtiene una matriz de eigenvectores (etiquetada como V), con la cual podemos encontrar los siguientes vectores, los cuales se encuentran relacionados con los operadores de aniquilación y creación del sistema,

$$|s_1\rangle = V^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |s_2\rangle = V^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |s_3\rangle = V^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ y } |s_4\rangle = V^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Usando la forma de la matriz de eigenfunciones V, queda de la forma:

$$\begin{aligned}
 |s_1\rangle &= \left(\cos \theta_1/2 \, c_1^\dagger + \sin \theta_1/2 \, c_4^\dagger \right) |0,0,0,0\rangle \\
 |s_2\rangle &= \left(-\sin \theta_1/2 \, c_1^\dagger + \cos \theta_1/2 \, c_4^\dagger \right) |0,0,0,0\rangle \\
 |s_3\rangle &= \left(\cos \theta_2/2 \, c_2^\dagger + \sin \theta_2/2 \, c_3^\dagger \right) |0,0,0,0\rangle \\
 |s_4\rangle &= \left(-\sin \theta_2/2 \, c_2^\dagger + \cos \theta_2/2 \, c_3^\dagger \right) |0,0,0,0\rangle.
 \end{aligned} \tag{8}$$

En las ecuaciones (8) los ángulos θ_1 y θ_2 son los siguientes,

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\cos \theta_1} &= \frac{\sqrt{(\epsilon_1 - \epsilon_4)^2 + 4t^2}}{\epsilon_1 - \epsilon_4}, \\
 \frac{1}{\cos \theta_2} &= \frac{\sqrt{(\epsilon_2 - \epsilon_3)^2 + 4t^2}}{\epsilon_2 - \epsilon_3}.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Es importante señalar que estos vectores ya se encuentran normalizados.

Para la solución de este sistema se les dieron los siguientes valores a las energías basados en los de la referencia [Venturelli, et al., 2013]: $\epsilon_1 = 2.1$, $\epsilon_3 = 2.9$, $\epsilon_4 = 4$ y $\epsilon_2 = \epsilon_1 + \epsilon_3 - \epsilon_4$.

Para estos valores de energía se obtiene los eigenvalores de la energía mostrados en la figura 4. En la cual se grafican los valores de los cuatro eigenvalores (ecuación 6) como función del tuneleo (t). Podemos observar la dependencia de la raíz cuadrada (ecuación 6) los eigenvalores con el tunelamiento (t)

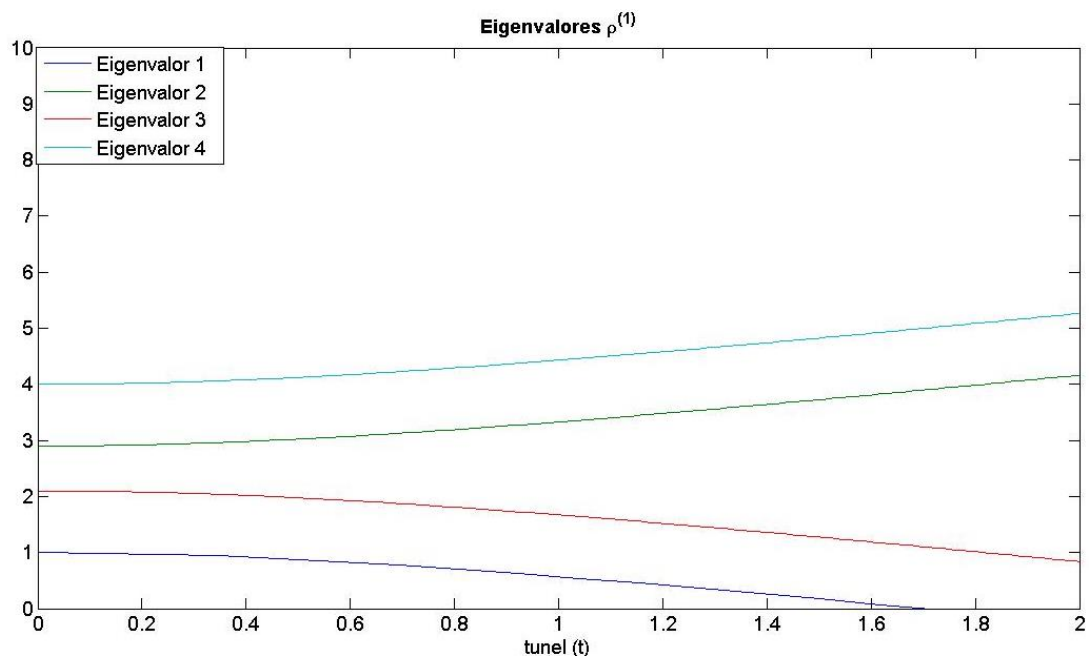


Figura 4 Se muestran los cuatro eigenvalores del Hamiltoniano del sistema cerrado con un electrón.

También se obtienen gráficas de poblaciones, esto significa, la probabilidad de ocupación en cada sitio, esto se realiza para cada eigenvalor.

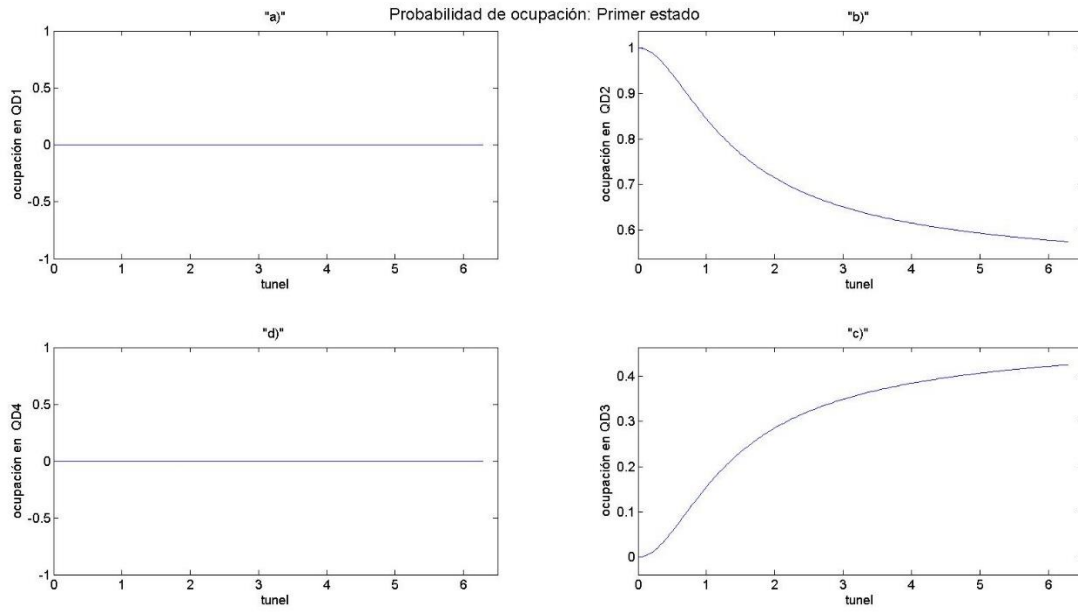


Figura 5 Probabilidad de ocupación por sitio del primer estado como función del tuneleo, a) el estado $|a_1^1\rangle$, b) el estado $|a_2^1\rangle$, c) el estado $|a_3^1\rangle$, d) el estado $|a_4^1\rangle$, para el primer estado. Se observa como es mayor la probabilidad de ocupación para el segundo punto cuántico $|a_2^1\rangle$ para el primer estado.

En la figura 5 se puede observar como la probabilidad de ocupación es mayor para el punto cuántico dos $|a_2^1\rangle$, (b), seguido del punto tres $|a_3^1\rangle$ (c).

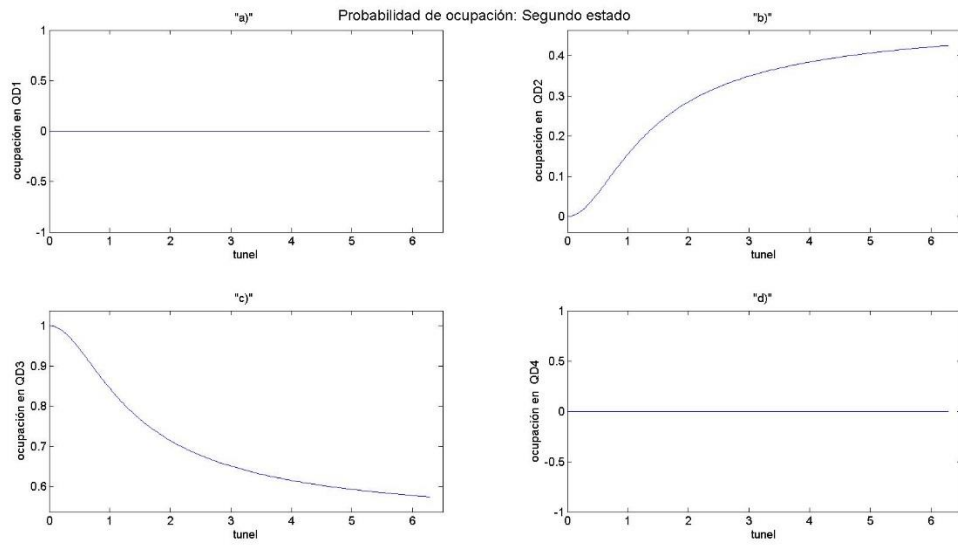


Figura 6 Probabilidad de ocupación por sitio del segundo estado como función del tuneleo, a) el estado $|a_1^1\rangle$, b) el estado $|a_2^1\rangle$, c) el estado $|a_3^1\rangle$, d) el estado $|a_4^1\rangle$. Se observa como es mayor la probabilidad de ocupación para el tercer punto cuántico $|a_3^1\rangle$ para el primer estado.

En la figura 6 podemos observar como la probabilidad de ocupación para el segundo estado es principalmente en el punto 3 (c), seguido del punto 2 (b)

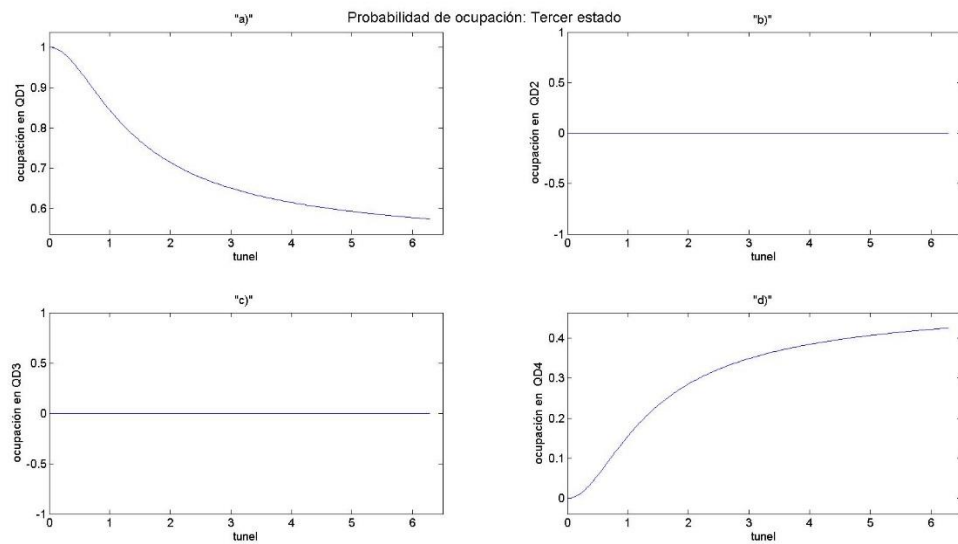


Figura 7 Probabilidad de ocupación por sitio del tercer estado como función del tuneleo, a) el estado $|a_1^1\rangle$, b) el estado $|a_2^1\rangle$, c) el estado $|a_3^1\rangle$, d) el estado $|a_4^1\rangle$. Se observa como es mayor la probabilidad de ocupación en el primer punto cuántico para el tercer estado

En la figura 7 se observa como la probabilidad de ocupación comienza en el primer punto (a) y va disminuyendo, mientras que la probabilidad del punto 4 (d) va aumentando

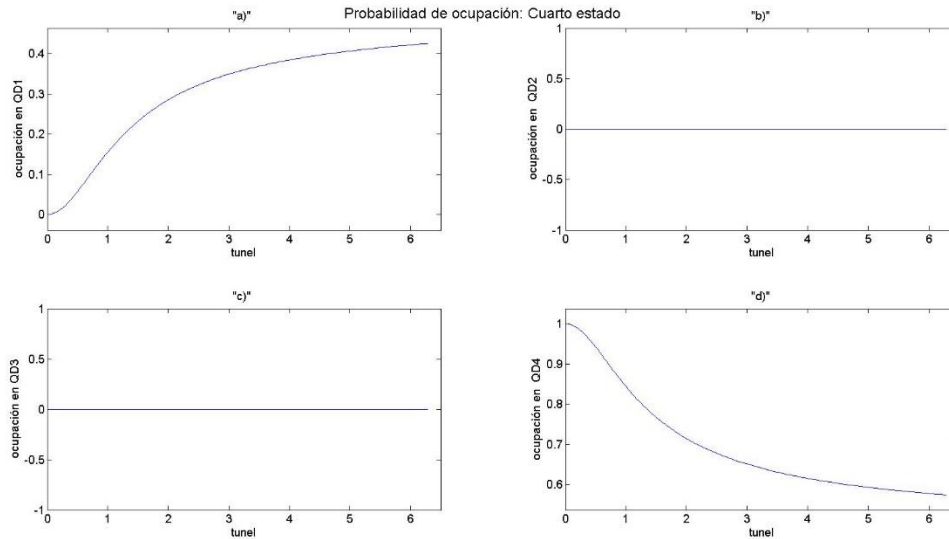


Figura 8 Probabilidad de ocupación por sitio del cuarto estado como función del tuneleo, a) el estado $|a_1^1\rangle$, b) el estado $|a_2^1\rangle$, c) el estado $|a_3^1\rangle$, d) el estado $|a_4^1\rangle$. Se observa como es mayor la probabilidad de ocupación en el cuarto punto cuántico para el cuarto estado

En la figura 8 se muestra como el punto 4 (c) es el que tiene mayor probabilidad de ocupación y que va decayendo, mientras que la probabilidad del punto 1 (a) sube gradualmente.

4.2. Sistema cerrado con dos electrones dentro del sistema.

En esta descripción tenemos el mismo arreglo de puntos que la parte anterior, solo que ahora se tienen dos electrones dentro del sistema, por lo que ahora se tiene que tomar en cuenta la interacción coulombiana entre dos electrones y establecer la base del sistema con la que se va a trabajar el modelo.

Por lo tanto, la base de sitio del sistema es la siguiente

$$|v\rangle = |n_1 n_2 n_3 n_4\rangle, \quad (10)$$

$$|a_1^2\rangle = |1 1 0 0\rangle, |a_2^2\rangle = |1 0 1 0\rangle, |a_3^2\rangle = |0 1 0 1\rangle \text{ y } |a_4^2\rangle = |0 0 1 1\rangle. \quad (11)$$

Esta base nos dice que sitio puede estar ocupado, por ejemplo, para el vector $|a_1^2\rangle$ implica que tenemos ocupación en el primer punto y en el segundo punto, para el vector $|a_2^2\rangle$ nos dice que tenemos ocupación en el segundo punto y en el tercer punto, para el vector $|a_3^2\rangle$ nos dice que tenemos ocupación en el segundo punto y en el cuarto punto y por ultimo para el vector $|a_4^2\rangle$ nos dice que tenemos ocupación en el tercer punto y en el cuarto punto.

El Hamiltoniano de este sistema se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{i=1}^4 \epsilon_i c_i^\dagger c_i - t [c_1^\dagger c_4 + c_4^\dagger c_1 + c_2^\dagger c_3 + c_3^\dagger c_2] + U_p (c_1^\dagger c_1 c_2^\dagger c_2 + c_3^\dagger c_3 c_4^\dagger c_4) \\ + U_d (c_1^\dagger c_1 c_3^\dagger c_3 + c_2^\dagger c_2 c_4^\dagger c_4), \end{aligned} \quad (12)$$

donde tenemos:

U_p es el potencial perpendicular entre QD_1 y QD_2 y QD_4 y QD_3 .

U_d es el potencial diagonal entre QD_1 y QD_3 y QD_2 y QD_4 .

En la base de sitio la representación matricial del Hamiltoniano es la siguiente

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_1 + \epsilon_2 + U_p & -t & -t & 0 \\ -t & \epsilon_4 + \epsilon_3 + U_d & 0 & -t \\ -t & 0 & \epsilon_3 + \epsilon_1 + U_d & -t \\ 0 & -t & -t & \epsilon_4 + \epsilon_2 + U_p \end{bmatrix}. \quad (13)$$

Para la solución de este sistema se usaron los valores de la energía dados en el caso anterior. Y para el potencial perpendicular $U_p = 12$ y el potencial diagonal $U_d = 2$.

Para estos valores, las probabilidades de ocupación en el sistema y sus eigenvalores se muestran en las figuras 9-13:

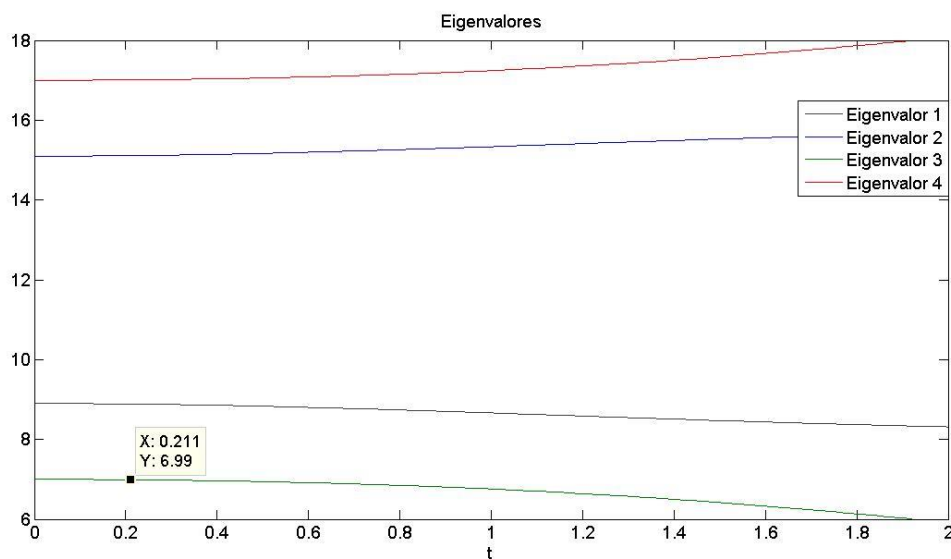


Figura 9. Se muestra la dependencia de los eigenvalores contra el efecto túnel “t” en el sistema de dos electrones.

En la figura 9 se puede observar como la dependencia del acoplamiento túnel afecta el comportamiento del eigenvalor, hay que recalcar que el eigenvalor con menos energía es el tercero, y que para el valor del acoplamiento túnel de 0.2 eV tenemos una energía mínima de 6.99 eV.

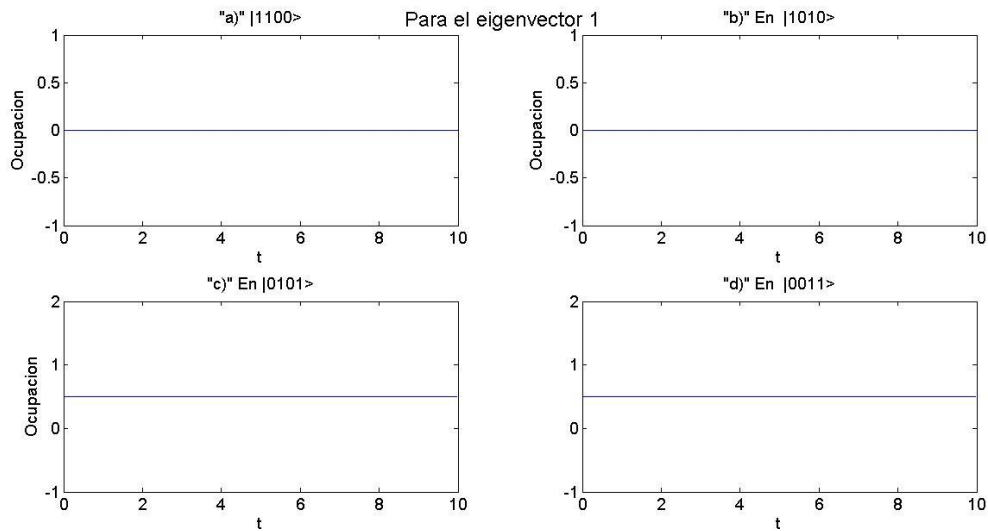


Figura 10. La probabilidad de ocupación de los estados de dos partículas como función del tuneleo para el eigenvalor 1. a) el estado $|a_1^2\rangle$, b) el estado $|a_2^2\rangle$, c) el estado $|a_3^2\rangle$ y d) es el estado $|a_4^2\rangle$. La probabilidad de estar en el estado cuántico c) y d) es la misma, mientras que para los dos primeros estados de número es cero.

La figura 10 muestra como es la probabilidad de ocupación para el primer eigenvalor, vemos como se encuentra en una combinación de los estados tres y cuatro, esto es, que es igual la probabilidad de ocupación entre el estado donde está ocupado el sitio tres y el cuatro, independientemente del valor del acoplamiento túnel (t)

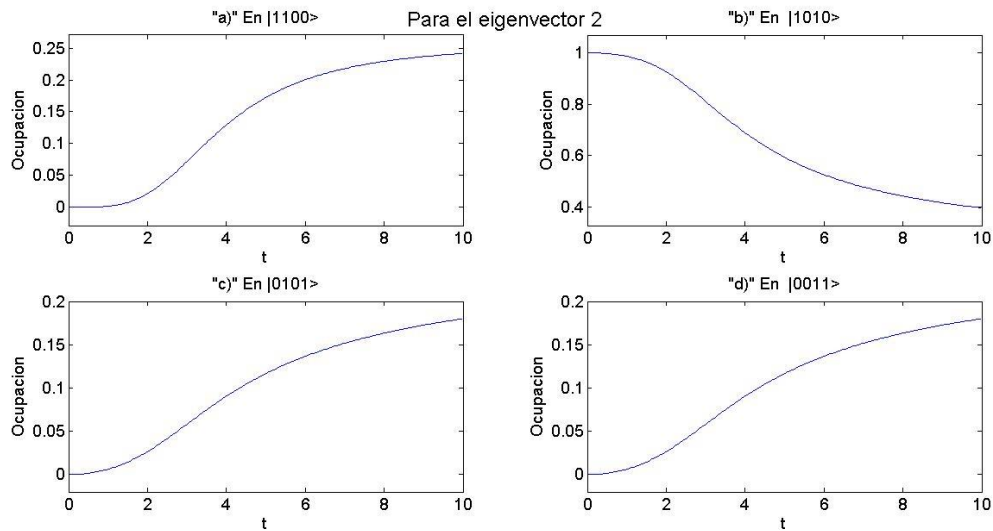


Figura 11. Se muestra la probabilidad de ocupación de los estados de dos partículas como función del tuneleo para el eigenestado 2. a) el estado $|a_1^2\rangle$, b) el estado $|a_2^2\rangle$, c) el estado $|a_3^2\rangle$ y d) es el estado $|a_4^2\rangle$. La probabilidad varía con respecto al tunelamiento y que la probabilidad de ocupación está dada con mayor probabilidad al QD1 y QD2.

En la figura 11 para el eigenestado dos, se observa como la probabilidad de ocupación principalmente está en el estado $|a_2^2\rangle$ (figura 11 b)), para valores pequeños de t y al decaer lentamente, conforme aumenta t , los otros estados a) $|a_1^2\rangle$, c) $|a_3^2\rangle$ y d) $|a_4^2\rangle$ comienzan a ocuparse

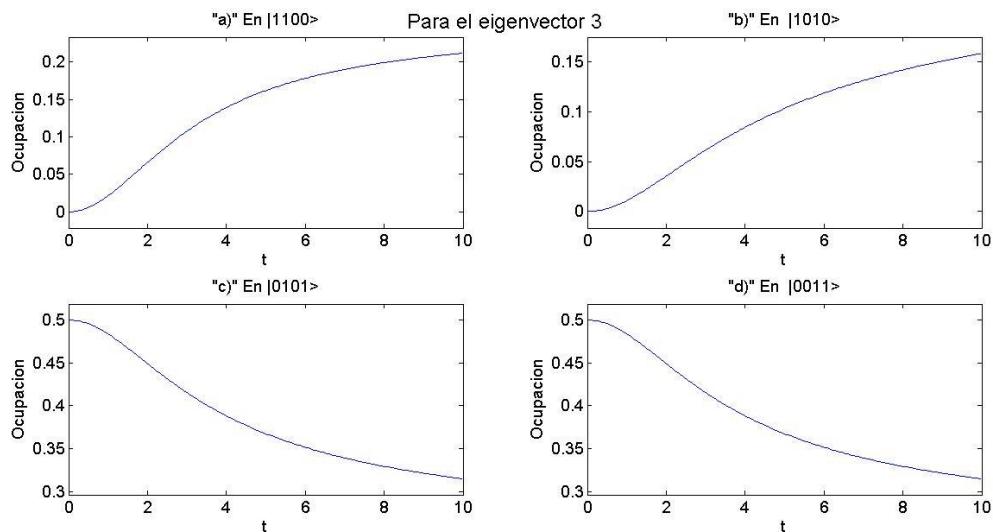


Figura 12. Se muestra la probabilidad de ocupación de los estados de dos partículas como función del tuneleo para el eigenestado 3. a) el estado $|a_1^2\rangle$, b) el estado $|a_2^2\rangle$, c) el estado $|a_3^2\rangle$ y d) es el estado $|a_4^2\rangle$. Para el tercer estado observamos que la mayor probabilidad de ocupación existe para los estados c) y d).

La figura 12 se muestra como la probabilidad de ocupación para el tercer eigenestado es compartida entre los estados $|a_3^2\rangle$ y $|a_4^2\rangle$, donde tenemos ocupados el sitio QD2 y QD4 para $|a_3^2\rangle$, y los sitios QD3 y QD4 para $|a_4^2\rangle$. Mientras que la probabilidad en los otros dos estados (a) y b)) comienza a subir lentamente.

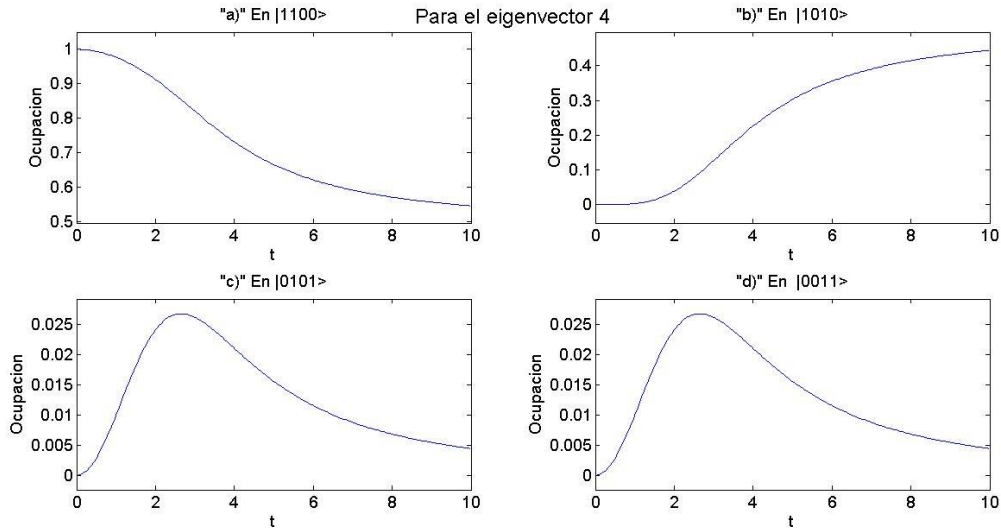


Figura 13. Se muestra la probabilidad de ocupación de los estados de dos partículas como función del tuneleo para el eigenestado 4. a) el estado $|a_1^2\rangle$, b) el estado $|a_2^2\rangle$, c) el estado $|a_3^2\rangle$ y d) es el estado $|a_4^2\rangle$. Este estado tenemos que la mayor probabilidad de ocupación es para el estado $|a_1^2\rangle$.

En la figura 13, para el eigenestado 4, podemos observar que en a) se tiene la para el eigenestado mayor probabilidad de ocupación este es estado uno $|a_1^2\rangle$, que implica tener electrones en QD1 y QD2. Se muestra además que para los estados $|a_3^2\rangle$ c) y $|a_4^2\rangle$ d), la ocupación es muy baja. En la figura b) podemos observar que la probabilidad para el estado $|a_2^2\rangle$ aumenta de manera rápida (a la misma velocidad que el estado $|a_1^2\rangle$ decae)

$$T_H > T_{R_1} = T_{R_2} > T_C \quad (14)$$

Consideramos la situación del sistema abierto con la posibilidad de tener cero, uno y dos electrones en el arreglo y desarrollaremos las condiciones de equilibrio para cada caso

5.1. Proceso de entrada de un electrón al sistema.

Ahora bien, a este sistema que tenemos, se le introduce un electrón. Para poder describir esta dinámica se tienen que tomar en cuenta varios aspectos.

Se tiene la misma base de sitio que se utilizó para el sistema cerrado (ecuación 10 y 11). El Hamiltoniano del sistema también seguirá siendo el mismo (ecuación 12), considerando el hecho de que estemos en un sistema cuántico abierto, esta será la dinámica coherente del sistema.

Pero ahora se cuenta con un Hamiltoniano de los baños o reservorios), el cual es de la siguiente forma:

$$\hat{H}(B) = \sum_k \epsilon_k^{(R_1)} b_k^{(R_1)\dagger} b_k^{(R_1)} + \sum_k \epsilon_k^{(C)} b_k^{(C)\dagger} b_k^{(C)} + \sum_k \epsilon_k^{(R_2)} b_k^{(R_2)\dagger} b_k^{(R_2)} + \sum_k \epsilon_k^{(H)} b_k^{(H)\dagger} b_k^{(H)}. \quad (15)$$

Los operadores $b_k^\dagger$ y b_k son los operadores de creación y aniquilación de cada baño, respectivamente con la distribución de energías ϵ_i , y son los que relacionan las temperaturas de cada baño a cada punto cuántico. Cabe resaltar que cada uno de estos operadores es independiente de los demás, y que cada uno está a diferente temperatura

Y por último se tienen las interacciones sistema-baño que son de la forma

$$\hat{H}_{int,1} = \gamma \sum_k \left(b_k^{(R_1)} c_1^\dagger + b_k^{(R_1)\dagger} c_1 \right). \quad (16)$$

El primer término de esta interacción implica la creación de un electrón en el punto cuántico 1 y aniquilación de un electrón en el reservorio 1, y el segundo término nos dice que se aniquila un electrón en el punto cuántico 1 y se crea un electrón en el reservorio 1. Esto nos dice como son la entrada de electrones al sistema (desde el baño) y la salida de electrones del sistema hacia el baño.

Los términos siguientes son análogos al anterior solo que cada uno de ellos se refiere a los otros puntos cuánticos (y su respectivo reservorio) distinto:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int,2} &= \gamma \sum_k \left(b_k^{(C)} c_2^\dagger + b_k^{(C)\dagger} c_2 \right) \\ \hat{H}_{int,3} &= \gamma \sum_k \left(b_k^{(R_2)} c_3^\dagger + b_k^{(R_2)\dagger} c_3 \right) \\ \hat{H}_{int,4} &= \gamma \sum_k \left(b_k^{(H)} c_4^\dagger + b_k^{(H)\dagger} c_4 \right)\end{aligned}\tag{17}$$

Podemos observar que al igual que en el Hamiltoniano de los baños, el Hamiltoniano de interacción tiene los operadores de creación y aniquilación del cada baño a temperatura independiente de los otros.

Con esta base el Hamiltoniano del sistema se puede expresar (como se realizó en el sistema cerrado) de la siguiente manera

$$\hat{H}(S) = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 & -t \\ 0 & \epsilon_2 & -t & 0 \\ 0 & -t & \epsilon_3 & 0 \\ -t & 0 & 0 & \epsilon_4 \end{bmatrix},\tag{18}$$

Utilizando las ecuaciones de los eigenestados del sistema cerrado (ecuaciones A3), podemos obtener los términos para obtener la ecuación maestra para la matriz de densidad (apéndice A), empezando por los términos de transición $m_{k l o p}^{(i,j)}$ ecuación (A11), que, para este sistema son, de forma general,

$$m_{l00l}^{(i,j)} = \sum \langle s_l | c_i^\dagger | 0,0,0,0 \rangle \langle 0,0,0,0 | c_j | s_l \rangle, \quad (19)$$

Donde los operadores $c_i^\dagger$ y c_j son los operadores de creación y aniquilación fermiónicos (son los operadores L_i de la ecuación A7)

Y de forma particular los términos de transición $m_{l00l}^{(i,j)}$ que son diferentes de cero,

$$\begin{aligned} m_{1001}^{(11)} &= \cos^2 \theta_1 / 2, \\ m_{1001}^{(12)} &= \cos \theta_1 / 2 \sin \theta_1 / 2, \\ m_{2002}^{(22)} &= \cos^2 \theta_1 / 2, \\ m_{2002}^{(12)} &= -\cos \theta_1 / 2 \sin \theta_1 / 2, \\ m_{3003}^{(33)} &= \cos^2 \theta_2 / 2, \\ m_{3003}^{(34)} &= \cos \theta_1 / 2 \sin \theta_1 / 2, \\ m_{4004}^{(44)} &= \cos^2 \theta_2 / 2, \\ m_{4004}^{(43)} &= -\cos \theta_1 / 2 \sin \theta_1 / 2. \end{aligned} \quad (20)$$

También se calculan los términos de correlación del baño (ecuaciones A20 y A21).

La forma de este sistema que tenemos provoca que no todos los términos de correlación existan ya que al tener operadores de creación y aniquilación fermiónicos (operan mediante el principio de exclusión de Pauli), además de que solo los operadores del mismo reservorio son términos diferentes de cero

Los términos $G_{ij}^\alpha(\tau)$ con la forma: $G_{1\ 2}, G_{2\ 1}, G_{3\ 4}, G_{4\ 3}, G_{5\ 6}, G_{6\ 5}, G_{7\ 8}, G_{8\ 7}$, son diferentes de cero, pero al estar acoplados con los términos de transición $m_{l\ 0\ 0\ l}^{(i,j)}$ como en la ecuación (A11). Solo los términos con subíndices 1-2,3-4,5-6,7-8 son diferentes de cero.

Con esto podemos observar como son los términos de correlación del baño que tenemos son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 G_{1\ 2}(\tau) &= e^{-i\omega_1\tau} [1 + \exp(\beta_1(\varepsilon_1 - \mu))]^{-1}, \\
 G_{3\ 4}(\tau) &= e^{-i\omega_2\tau} [1 + \exp(\beta_2(\varepsilon_2 - \mu))]^{-1}, \\
 G_{5\ 6}(\tau) &= e^{-i\omega_3\tau} [1 + \exp(\beta_3(\varepsilon_3 - \mu))]^{-1}, \\
 G_{7\ 8}(\tau) &= e^{-i\omega_4\tau} [1 + \exp(\beta_4(\varepsilon_4 - \mu))]^{-1}.
 \end{aligned} \tag{21}$$

Para los términos de $G_{ji}^\alpha(-\tau)$ ecuación (21) implica el mismo análisis y los términos no cero serían:

$$\begin{aligned}
 G_{2\ 1}(-\tau) &= e^{-i\omega_1\tau} [1 + \exp(-\beta_1(E_1 - \mu))]^{-1}, \\
 G_{4\ 3}(-\tau) &= e^{-i\omega_2\tau} [1 + \exp(-\beta_2(E_2 - \mu))]^{-1}, \\
 G_{6\ 5}(-\tau) &= e^{-i\omega_3\tau} [1 + \exp(-\beta_3(E_3 - \mu))]^{-1}, \\
 G_{8\ 7}(-\tau) &= e^{-i\omega_4\tau} [1 + \exp(-\beta_4(E_4 - \mu))]^{-1}.
 \end{aligned} \tag{22}$$

En donde hay que también tener en cuenta estos parámetros β_i que relacionan las temperaturas de cada reservorio con la constante de Boltzman (k_b) de la siguiente manera,

$$\beta_i = (T_i k_b)^{-1}, \tag{23}$$

Habiendo obtenido tanto los términos de correlación del baño y los valores de los términos de transición $m_{l\ 0\ 0\ l}^{(i,j)}$, podemos calcular los parámetros gamma (ecuaciones A23 y A24), e introduciendo los valores de $m_{l\ 0\ 0\ l}^{(i,j)}$ y $G_{ij}^{\alpha}(\tau)$ obtenidos, y realizando un poco de algebra (ecuaciones A14 y A15) llegamos a las siguientes expresiones,

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{s_1\ 0\ 0\ s_1}^{+}(t) &= 1/\hbar^2 \left[\cos^2 \theta_1/2\ n(E_1, \beta_1) + \sin^2 \theta_1/2\ n(E_1, \beta_2) \right], \\
 \Gamma_{s_2\ 0\ 0\ s_2}^{+}(t) &= 1/\hbar^2 \left[\sin^2 \theta_1/2\ n(E_2, \beta_1) + \cos^2 \theta_1/2\ n(E_2, \beta_2) \right], \\
 \Gamma_{s_3\ 0\ 0\ s_3}^{+}(t) &= 1/\hbar^2 \left[\cos^2 \theta_2/2\ n(E_3, \beta_3) + \sin^2 \theta_2/2\ n(E_3, \beta_4) \right], \\
 \Gamma_{s_4\ 0\ 0\ s_4}^{+}(t) &= 1/\hbar^2 \left[\sin^2 \theta_2/2\ n(E_4, \beta_3) + \cos^2 \theta_2/2\ n(E_4, \beta_4) \right],
 \end{aligned} \tag{24}$$

en donde estas funciones $n(E_i, \beta_j)$ son distribuciones de Fermi como sigue

$$n(E_i, \beta_j) = \left[1 + \exp(\beta_j(E_i - \mu)) \right]^{-1}. \tag{25}$$

Y también se obtienen las siguientes relaciones de estos parámetros gamma,

$$\Gamma_{s_l\ 0\ 0\ s_l}^{+}(E_l, \beta_k) = \Gamma_{s_l\ 0\ 0\ s_l}^{-}(E_l, -\beta_k) = \Gamma_{0\ s_l\ s_l\ 0}^{-}(-E_l, -\beta_k). \tag{26}$$

De la ecuación 19 podemos describir como son las transiciones de cero a un electrón con

$$W_{0\ s_l} = 2\text{Re}\{\Gamma_{s_l\ 0\ 0\ s_l}^{+}\}.$$

Ya habiendo calculado los parámetros gamma, podemos ver la forma de la ecuación maestra, para $s' = s$ obtenemos las siguientes cinco ecuaciones acopladas

$$\begin{aligned}
0 &= W_{s_1 0} R_{00}^{(i)} - R_{s_1 s_1}^{(i)} W_{0 s_1}, \\
0 &= W_{s_2 0} R_{00}^{(i)} - R_{s_2 s_2}^{(i)} W_{0 s_2}, \\
0 &= W_{s_3 0} R_{00}^{(i)} - R_{s_3 s_3}^{(i)} W_{0 s_3}, \\
0 &= W_{s_4 0} R_{00}^{(i)}(t) - R_{s_4 s_4}^{(i)} W_{0 s_4}, \\
0 &= \sum_m W_{0m} R_{mm}^{(i)} - R_{00}^{(i)} \sum_m W_{m0}.
\end{aligned} \tag{27}$$

5.2. Proceso de transición de uno a dos electrones

Para el sistema con dos electrones dentro, lo analizamos desde una perspectiva diferente. Decimos que tenemos un electrón ya en el sistema y analizamos la entrada de otro electrón, esto se realiza teniendo en cuenta la base del sistema anterior y expresando los valores de las eigenfunciones en términos de la base de un electrón para poder tener consistencia

En donde tendremos la misma base de sitio que en el sistema cerrado (ecuaciones A5 y A6)

El Hamiltoniano del sistema $H(S)$ (ecuación A7), el Hamiltoniano de los baños y los de interacción serán los mismos que para el sistema con un electrón, ya que ni el sistema, ni la interacción y ni los baños cambian su manera de actuar con el sistema si hay uno o dos electrones (ecuaciones 39,40 y 41).

Para poder resolver el sistema a partir de la idea de introducir un electrón más al sistema abierto que se tenía, se necesita cambiar de base (a la base de sitio de un electrón), para lograr esto primero se obtienen los eigenvalores y eigenvectores del Hamiltoniano (ecuación 46), y creamos una matriz con estos eigenvectores de la siguiente manera:

$$V_{norm} = [V_1, V_2, V_3, V_4], \tag{28}$$

Numéricamente esta matriz es de 4x4 y toma la siguiente forma

$$V_{norm} = \begin{bmatrix} -0.0174 & 0 & -0.9998 & -0.0004 \\ -0.0119 & 0 & 0.0006 & -0.9999 \\ -0.7069 & 0.7071 & 0.0123 & 0.0084 \\ -0.7069 & -0.7071 & 0.0123 & 0.0084 \end{bmatrix}. \quad (29)$$

Ya con esta matriz podemos obtener los vectores $|r_i\rangle$ los cuales representan como son los estados en el sistema de dos electrones; como será el estado final, a partir de la transición de tener un electrón pasar a dos electrones,

$$|r_i\rangle = V_{norm}(i, 1)|a_1^1\rangle + V_{norm}(i, 2)|a_2^1\rangle + V_{norm}(i, 3)|a_3^1\rangle + V_{norm}(i, 4)|a_4^1\rangle. \quad (30)$$

Ya que se tienen a los estados a los que se quiere llegar (a partir de la base del sistema de un electrón), podemos definir las probabilidades de transición del estado $|s_i\rangle$ a un estado $|r_j\rangle$ de la siguiente manera

$$m_{j k m n}^{(i,j)} = \sum \langle r_j | c_i^\dagger | s_k \rangle \langle s_m | c_j | r_n \rangle. \quad (31)$$

Las energías de este sistema se tornan más complejas pues ahora no solo tenemos que tomar en cuenta la energía del Hamiltoniano, sino la diferencia de energías del sistema con un electrón (ecuaciones 44) y las eigenenergías del sistema de dos electrones (los eigenvalores del Hamiltoniano), obteniendo la energía total como la diferencia de ambas

$$E_{i j} = E_i^{(2)} - E_j^{(1)}, \quad (32)$$

donde el superíndice determina si son las energías del sistema con un electrón o son las eigenenergías del Hamiltoniano de dos electrones.

Para poder así tener las distribuciones de Fermi en base a las energías totales y estos parámetros β_i (51),

$$n(E_i^{tot}, \beta_j) = \left[1 + \exp(\beta_j(E_{i,j} - \mu)) \right]^{-1}, \quad (33)$$

Tomando en cuenta las distribuciones fermiónicas y los parámetros $m_{j,k,m,n}^{(i,j)}$ se obtienen las transiciones W_{sm} las cuales son los coeficientes de las ecuaciones a resolver. Su forma general es la siguiente:

$$W_{m,n} = \frac{2}{\hbar^2} \sum_{i,j} m_{j,k,m,n}^{(i,j)} * n(E_i^{tot}, \beta_j) = \frac{2}{\hbar^2} \sum_{i,j} |\langle r_n | c_i^\dagger | s_m \rangle|^2 * n(E_i^{(2)} - E_j^{(1)}, \beta_j). \quad (34)$$

Los valores explícitos de las éstas transiciones se muestran en el apéndice A

Ya habiendo calculado las transiciones W 's, podemos ver la forma de la ecuación maestra para este sistema (ecuación 36), primero para cuando $s' = s$ se tienen las siguientes cuatro ecuaciones acopladas

$$\begin{aligned} 0 &= W_{r_1 s_1} R_{11}^{(1)} + W_{r_2 s_1} R_{22}^{(1)} + W_{r_3 s_1} R_{33}^{(1)} + W_{r_4 s_1} R_{44}^{(1)} - R_{11}^{(2)} [W_{s_1 r_1} + W_{s_1 r_2} + W_{s_1 r_3} + W_{s_1 r_4}] \\ 0 &= W_{r_1 s_2} R_{11}^{(1)} + W_{r_2 s_2} R_{22}^{(1)} + W_{r_3 s_2} R_{33}^{(1)} + W_{r_4 s_2} R_{44}^{(1)} - R_{22}^{(2)} [W_{s_2 r_1} + W_{s_2 r_2} + W_{s_2 r_3} + W_{s_2 r_4}] \\ 0 &= W_{r_1 s_3} R_{11}^{(1)} + W_{r_2 s_3} R_{22}^{(1)} + W_{r_3 s_3} R_{33}^{(1)} + W_{r_4 s_3} R_{44}^{(1)} - R_{33}^{(2)} [W_{s_3 r_1} + W_{s_3 r_2} + W_{s_3 r_3} + W_{s_3 r_4}] \\ 0 &= W_{r_1 s_4} R_{11}^{(1)} + W_{r_2 s_4} R_{22}^{(1)} + W_{r_3 s_4} R_{33}^{(1)} + W_{r_4 s_4} R_{44}^{(1)} - R_{44}^{(2)} [W_{s_4 r_1} + W_{s_4 r_2} + W_{s_4 r_3} + W_{s_4 r_4}] \end{aligned} \quad (35)$$

Donde el superíndice implica si es la matriz de densidad de un electrón (el número 1) o la de dos electrones (número 2)

Se tiene además la siguiente condición de normalización para el sistema completo (0,1 y 2 electrones) es de la siguiente forma,

$$R_{00} + R_{11}^{(1)} + R_{22}^{(1)} + R_{33}^{(1)} + R_{44}^{(1)} + R_{11}^{(2)} + R_{22}^{(2)} + R_{33}^{(2)} + R_{44}^{(2)} = 1. \quad (36)$$

Para la solución de las ecuaciones el sistema se encontrará en relajación ($\dot{R} = 0$) y además si se observa que se puede escribir en su forma matricial, es

$$MR = B. \quad (37)$$

Explícitamente M será:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -\sum W_{s_i 0} & W_{0 s_1} & W_{0 s_2} & W_{0 s_3} & W_{0 s_4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{s_1 0} & -W_{0 s_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{s_2 0} & 0 & -W_{0 s_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{s_3 0} & 0 & 0 & -W_{0 s_3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{s_4 0} & 0 & 0 & 0 & -W_{0 s_4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_{r_1 s_1} & W_{r_2 s_1} & W_{r_3 s_1} & W_{r_4 s_1} & -\sum W_{s_1 r_i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_{r_1 s_2} & W_{r_2 s_2} & W_{r_3 s_2} & W_{r_4 s_2} & 0 & -\sum W_{s_2 r_i} & 0 & 0 \\ 0 & W_{r_1 s_3} & W_{r_2 s_3} & W_{r_3 s_3} & W_{r_4 s_3} & 0 & 0 & -\sum W_{s_3 r_i} & 0 \\ 0 & W_{r_1 s_4} & W_{r_2 s_4} & W_{r_3 s_4} & W_{r_4 s_4} & 0 & 0 & 0 & -\sum W_{s_4 r_i} \end{bmatrix}, \quad (38)$$

La matriz R y la B son, respectivamente:

$$R = \begin{bmatrix} R_{00} \\ R_{11}^{(1)} \\ R_{22}^{(1)} \\ R_{22}^{(1)} \\ R_{33}^{(1)} \\ R_{44}^{(1)} \\ R_{11}^{(2)} \\ R_{22}^{(2)} \\ R_{33}^{(2)} \\ R_{44}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (39)$$

5.2.1. Cambio de base

Hay que tener en cuenta que todo este análisis se realizó en la eigenbase del sistema de un electrón, por lo que para poder tener resultados que se puedan interpretar de manera más simple se tiene que realizar un cambio de base de número $|a_i^1\rangle, i = 1,2,3,4$ de la siguiente manera:

$$\rho_{sitio}(i,j) = R_{sol}(1,1) * V_{norm}(1,i) * V_{norm}^*(1,j) + R_{sol}(2,2) * V_{norm}(2,i) * V_{norm}^*(2,j) + R_{sol}(3,3) * V_{norm}(3,i) * V_{norm}^*(3,j) + R_{sol}(4,4) * V_{norm}(4,i) * V_{norm}^*(4,j). \quad (40)$$

Donde podemos observar que la matriz V es la matriz de cambio de base (ecuación 48), y $R_{sol}(i,j)$ son las soluciones de la ecuación 56.

Esto se realiza pues hay que recordar que todo el sistema está trabajándose en la eigenbase, por lo que para obtener resultados y referirnos a los sitios tenemos que estar en la base de sitio.

Capítulo 6. Correlaciones cuánticas y corriente de calor

6.1. Concurrencia

Caracterización del entrelazamiento

También es conocido como el problema de la separabilidad y se encuentra ampliamente estudiado para sistemas bipartitos. Considerando el estado puro compartido entre A y B de la forma $|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B$, es posible escribirlo en la base bi-ortogonal de Schmidt como sigue:

$$|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\phi_i^A\rangle \otimes |\phi_i^B\rangle \quad (41)$$

donde $|\phi_i^{A(B)}\rangle$ son los estados ortonormales correspondientes a los subsistemas A y B. Una métrica adecuada para el entrelazamiento debe reunir dos requisitos

1. No se incrementa bajo la acción de operaciones locales y comunicación clásica
2. Se anula para estados separables

Wootters en 1998 demostró que para el estado (41) la entropía de Von Neumann para cualquiera de los subsistemas

$$E(\Phi) = S(\rho^{A(B)}) = - \sum_i c_i^2 \log_2 c_i^2, \quad (42)$$

cumple con las características de la métrica en el caso puro. No obstante, esto no es necesariamente cierto si se considera un estado mixto. Si el estado es mixto, ρ se expresa a través de su descomposición en los estados $|\Phi_i\rangle$ de la forma,

$$\rho = \sum_{j=1}^n p_j |\Phi_j\rangle\langle\Phi_j| \quad (43)$$

El entrelazamiento de ρ , tal como se define en (42) será dependiente de la descomposición escogida, y es necesario encontrar aquella descomposición que minimiza dicha función. De esto surge la idea del entrelazamiento de formación

$$E_f(\rho) = \inf \sum_j p_j E(\Phi_j). \quad (44)$$

La caracterización del entrelazamiento como en la (ecuación 44) si bien es en general no trivial, Wootters en 1997 obtuvo una expresión para el caso de un par de qubits de la forma

$$E(C) = h\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}\right), \quad (45)$$

donde $h(x) = -x\log_2 x - (1 - x)\log_2(1 - x)$. En esta ecuación, C es un nuevo parámetro denominado Concurrencia. Se puede observar que $E(C)$ tiene un comportamiento monótono para $0 \leq C \leq 1$, por lo que C puede utilizarse como para una medida del entrelazamiento por sí misma, la cual es de hecho la métrica más utilizada para un par de qubits.

La concurrencia para una matriz de dos qubits mixta se obtiene mediante [Wootters, William, 1998].

$$\mathcal{C}(\rho) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (46)$$

donde λ_i son los eigenvalores la siguiente matriz:

$$\rho\tilde{\rho} = \rho[(\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)] \quad (47)$$

con σ_y la matriz de Pauli

6.2. Discordia

La discordia cuántica toma en consideración el total de las correlaciones que no pueden explicarse clásicamente en un sistema, y ha sido identificada como la primera medida de las correlaciones cuánticas además del entrelazamiento [Henderson L., 2001, Ollivier, H. 2001, Zurek, W. H. 2000].

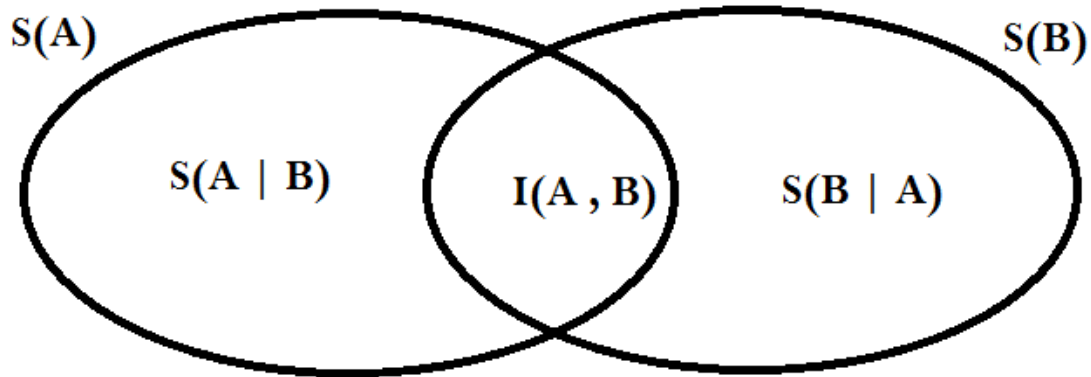


Figura 15 Entropías de un sistema bipartito

Antes de definir la discordia cuántica es necesario describir la definición de información mutua, las cuales involucran la entropía de Shannon. La entropía de Shannon cuantifica el grado de desconocimiento de una variable utilizada para codificar información. Clásicamente la información mutua de un sistema bipartito descrito cada uno por variables aleatorias, permite cuantificar el grado de independencia mutua entre las variables (figura 15). Es decir, cuantifica el monto de información que se puede inferir de una variable conociendo otra. La información mutua puede definirse para sistemas clásicos mediante dos formas equivalentes [Streltsov 2005].

$$H(X, Y) = H(X) + H(Y) - H(X | Y), \quad (48)$$

y

$$J(X : Y) = H(X) - H(X | Y). \quad (49)$$

Donde $H(X) = -\sum_x p_x \log_2 p_x$ es la entropía clásica de Shannon para la variable X , donde p_x es la probabilidad de que la variable X tome valor de x , $H(X, Y)$ es la entropía conjunta para dos variables y $H(X | Y)$ es la entropía condicional definida mediante $H(X | Y) = -\sum_y p_y H(X | y)$, es decir, la entropía de la variable X dado que se obtuvo un valor y en la variable Y , a través del teorema de Bayes se puede demostrar que $H(X | Y) = H(X, Y) - H(Y)$, por lo que las dos expresiones (76 y 77) son iguales.

Las cantidades I y J no son más equivalentes cuando se consideran sistemas cuánticos de forma análoga a los sistemas clásicos se puede definir la información mutua como se ilustra en la figura 14 a través de

$$I(\rho^{AB}) = S(\rho^A) + S(\rho^B) - S(\rho^{AB}) \quad (50)$$

Donde ahora S representa la entropía de Von Newmann, ρ^{AB} es la matriz de densidad del sistema completo y $\rho^{A(B)}$ las matrices reducidas de cada subsistema que se obtienen mediante $\rho^{A(B)} = \text{Tr}_{B(A)}(\rho^{AB})$.

La diferencia entre I y J surge de la dificultad de definir el equivalente a J para sistemas cuánticos, esto debido al término condicional. Pues la entropía condicional cuántica implica realizar una medición en uno de los subsistemas para así ganar información sobre el otro. Con esto, se puede definir la entropía condicional de A , dado B [Ollivier, H. 2001, Zurek, W. H. 2000] mediante

$$S(\rho_{\Pi_B}^A)(A | B) = \sum_i p_i S(\rho_i^B), \quad (51)$$

Donde Π_k^B son los elementos del operador de medida valorado positivo (POVM, del inglés, positive operator valued measure) de medición sobre el sistema B de esta manera, se puede obtener J como

$$J_{cl}(A | B) = S(\rho^A) - S(\rho_{\Pi_B}^A)(A | B). \quad (52)$$

Cabe destacar, que se ha nombrado J_{cl} la ecuación 52 puesto que esta entropía condicional está relacionada con las correlaciones que surgen de forma clásica. Sin embargo, J_{cl} depende de los elementos del POVM seleccionados, por lo que obtener la discordia, implica buscar los elementos que maximicen la ecuación 52 dado que indican la correlación clásica máxima del sistema, de ahí se desprende que la definición de la discordia cuántica, considerando que las mediciones se realizan en el sistema B incluya una optimización como sigue

$$D_B(\rho^{AB}) = I(\rho^{AB}) - \max J_{cl}(A | B). \quad (53)$$

La discordia cuántica mostrada en 53 se denomina discordia de B a A. Finalmente, la expresión 53 se puede escribir como

$$D_B(\rho^{AB}) = S(\rho^B) - S(\rho^B) + \min_{\{\Pi_i\}} [S(\rho_{\Pi_B}^A)(A | B)] \quad (54)$$

Realizando un poco de algebra podemos llegar a la siguiente expresión de la discordia cuántica.

$$D = S(\rho^A) - S(\rho) + \min_{|n|=1} \sum_k p_k S(\rho_k^B) \quad (55)$$

donde

$$S(\rho) = -Tr(\rho \log_2 \rho) \quad (56)$$

Es la entropía de von Newmann. [Lu M., et al 2011]

En este trabajo se usa métodos de cálculo de la discordia cuántica de dos qubits donde el proceso de minimización de las medidas de uno de los subsistemas se pueden determinar de forma eficiente. [Streltsov 2005].

6.3. Energía promedio

Para obtener el valor de la energía promedio se parte de tomar el valor promedio de la Hamiltoniano, así obtenemos la energía térmica,

$$\langle H \rangle = Tr(H\rho) \quad (57)$$

Para este sistema cuántico se tiene el hamiltoniano en la eigenbase por lo tanto esta traza se convierte en la suma de las energías de sitio, multiplicadas por el elemento de la matriz de densidad correspondiente (y recordando que también la matriz de densidad es diagonal)

$$\bar{E} = \sum_{i=1}^4 \epsilon_i^{(1)} \rho_{s_i s_i}^{(1)} + \sum_{j=1}^4 \epsilon_j^{(2)} \rho_{r_j r_j}^{(2)} \quad (58)$$

6.4. Corriente de calor

Teniendo en cuenta que la evolución de ρ está determinada por

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \sum_{l=1}^4 \mathcal{D}_l[\rho] \quad (59)$$

donde para cada reservorio $\mathcal{D}_i$ representa un disipador de Lindblad asociado en términos de las probabilidades de transición $W_{s's'}$

si se toma el valor promedio de la Hamiltoniano, obtenemos la energía térmica,

$$\langle H \rangle = \text{Tr}(H\rho) \quad (60)$$

Y se deriva con respecto al tiempo, se obtiene la siguiente expresión,

$$\frac{d\langle H \rangle}{dt} = \text{Tr}(H\dot{\rho}) \quad (61)$$

Y sustituyendo el valor de $\dot{\rho}$ en esta ecuación obtenemos,

$$\frac{d\langle H \rangle}{dt} = \text{Tr} \left(-iH[H, \rho] + H \sum_{l=1}^4 \mathcal{D}_l[\rho] \right) = -i \text{Tr}(H[H, \rho]) + \text{Tr} \left(H \sum_{l=1}^4 \mathcal{D}_l[\rho] \right) \quad (62)$$

El primer término $\text{Tr}(H[H, \rho]) = \text{Tr}(H(H\rho - \rho H))$ y por propiedades de la traza es cero. Además, esta ecuación la resolvemos para el régimen de estado estacionario ($\dot{\rho} = 0$) produciendo la configuración asintótica ρ^∞ , como sigue

$$\rho^\infty = \rho_{00}|0\rangle\langle 0| + \sum_{i=1}^4 \rho_{s_i s_i}^{(1)} |s_i\rangle\langle s_i| + \sum_{j=1}^4 \rho_{r_j r_j}^{(2)} |r_j\rangle\langle r_j| \quad (63)$$

Y esta configuración produce que las corrientes de calor $\langle J_{Q,l} \rangle$ fluyan a través del l-ésimo reservorio y se calculan de la siguiente manera

$$\langle \mathcal{J}_{Q,l} \rangle = Tr(\mathcal{H}_{QD} \mathcal{D}_l[\rho^\infty]) \quad (64)$$

Recordemos que esta matriz de densidad es diagonal para cada uno de los elementos, y si se toma en cuenta que el Hamiltoniano está en la eigenbase (esto implica que también es diagonal), esto provoca que podamos reescribir la ecuación 66 de la siguiente manera:

$$\langle \mathcal{J}_{Q,i} \rangle = \sum_{j, l} \epsilon_i^{(l)} \mathcal{D}_l[\rho^\infty] \quad (65)$$

Se tiene que definir una matriz para el término disipativo ($\sum_l \mathcal{D}_l[\rho^\infty] = M' \rho^\infty$), ya que este va a relacionar cada uno de los reservorios, se obtiene a partir de la ecuación para el sistema en equilibrio (ecuación 57):

$$\begin{bmatrix} -\sum W_{s_i 0} & W_{0 s_1} & W_{0 s_2} & W_{0 s_3} & W_{0 s_4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{s_1 0} & -W_{0 s_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{s_2 0} & 0 & -W_{0 s_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{s_3 0} & 0 & 0 & -W_{0 s_3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{s_4 0} & 0 & 0 & 0 & -W_{0 s_4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_{r_1 s_1} & W_{r_2 s_1} & W_{r_3 s_1} & W_{r_4 s_1} & -\sum W_{s_1 r_i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_{r_1 s_2} & W_{r_2 s_2} & W_{r_3 s_2} & W_{r_4 s_2} & 0 & -\sum W_{s_2 r_i} & 0 & 0 \\ 0 & W_{r_1 s_3} & W_{r_2 s_3} & W_{r_3 s_3} & W_{r_4 s_3} & 0 & 0 & -\sum W_{s_3 r_i} & 0 \\ 0 & W_{r_1 s_4} & W_{r_2 s_4} & W_{r_3 s_4} & W_{r_4 s_4} & 0 & 0 & 0 & -\sum W_{s_4 r_i} \end{bmatrix}, \quad (66)$$

Y sabiendo que el termino disipativo es el producto de la matriz de densidad asintótica el término de corriente de calor nos queda de la siguiente manera.

$$\langle \mathcal{J}_{Q,i} \rangle = -\sum_{i, l} \epsilon_i^{(1)} \rho_{s_i s_i}^{(1)} W_{0 s_i}^{\beta_l} - \sum_{j, l} \epsilon_j^{(2)} \rho_{r_i r_i}^{(2)} W_{s_j r_i}^{\beta_l} \quad (67)$$

Para realizar la suma se tiene que tomar en cuenta que los factores de Boltzman β_l los cuales se refieren a las probabilidades $W_{s,s'}$ de los reservorios térmicos identificados por el reservorio de cada punto cuántico donde se requiere calcular la corriente.

Capítulo 7. Resultados

Para obtener los resultados, se desarrolló un código en el programa MatLab para resolver las ecuaciones (ecuaciones 46 y 54) y también para el sistema matricial (ecuaciones 57 y 58).

Se realizaron en tres etapas: la primera es poniendo las temperaturas de los reservorios iguales, la segunda etapa es teniendo los reservorios a diferentes temperaturas y las energías ε_i del hamiltoniano del sistema $H(S)$ distintas, y por último se tiene las energías del hamiltoniano $H(S)$ iguales a cero $\varepsilon_i = 0$.

7.1. Solución al sistema (Temperaturas iguales)

El primer paso para observar la consistencia del modelo, esto es ver su comportamiento cuando las temperaturas de los reservorios son las mismas, ya que con esto se espera ver la estabilidad térmica en el sistema, ya que no existe un sitio preferente.

Los parámetros utilizados para el cálculo fueron el efecto túnel de 0.1 eV, para el valor del potencial químico μ se utilizó de .9792 eV, el potencial diagonal de 2 y el potencial perpendicular de 12.

A partir de estos parámetros se soluciona la ecuación 56, y se obtienen los elementos diagonales de la matriz de densidad en equilibrio. Primero se presenta la solución para el elemento ρ_{00}

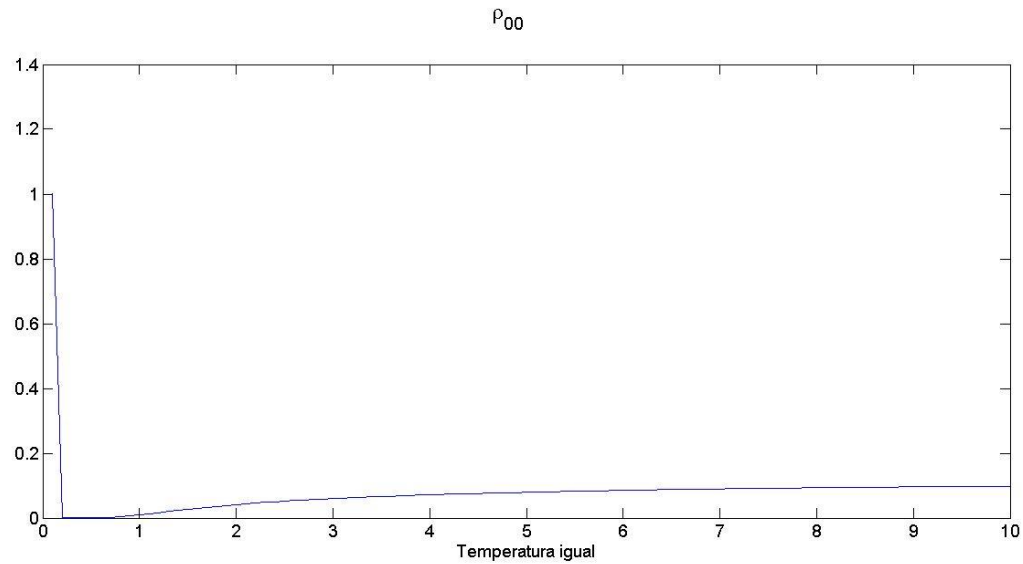


Figura 16. Probabilidad de no tener electrones en el sistema como función de temperatura se observa como es el cambio en ausencia de electrones cuando la temperatura varía de la misma manera en los cuatro reservorios

Podemos observar que en la figura 16 la probabilidad de que exista el estado vacío solo es grande a temperaturas bajas, que es la condición inicial que se estableció y después va cayendo la probabilidad de que el sistema se encuentre vacío.

Habiendo calculado la probabilidad del estado vacío, se procede a graficar los elementos diagonales de las soluciones para la matriz de densidad en equilibrio de un electrón.

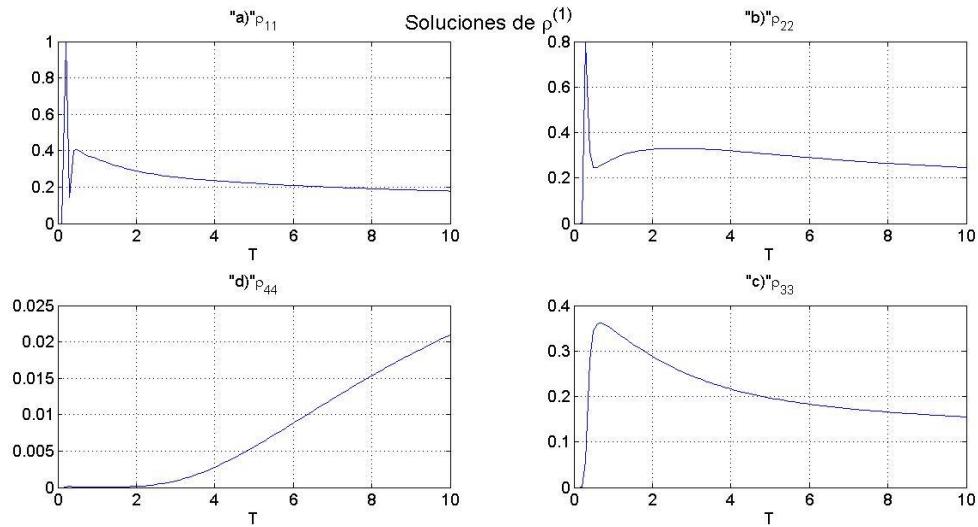


Figura 17. Soluciones de la matriz de densidad de un electrón como función de la temperatura para a) estado $|a_2^1\rangle$, b) estado $|a_2^1\rangle$, c) estado $|a_3^1\rangle$ y d) para el estado $|a_4^1\rangle$

Se observa en la figura 17 el comportamiento de la matriz de densidad de un electrón en donde en el estado 1 (figura 17 a)) se tiene la mayor probabilidad de existir cuando la temperatura es baja

Por último, se tiene las soluciones de la matriz de densidad para el caso de dos electrones en el sistema.

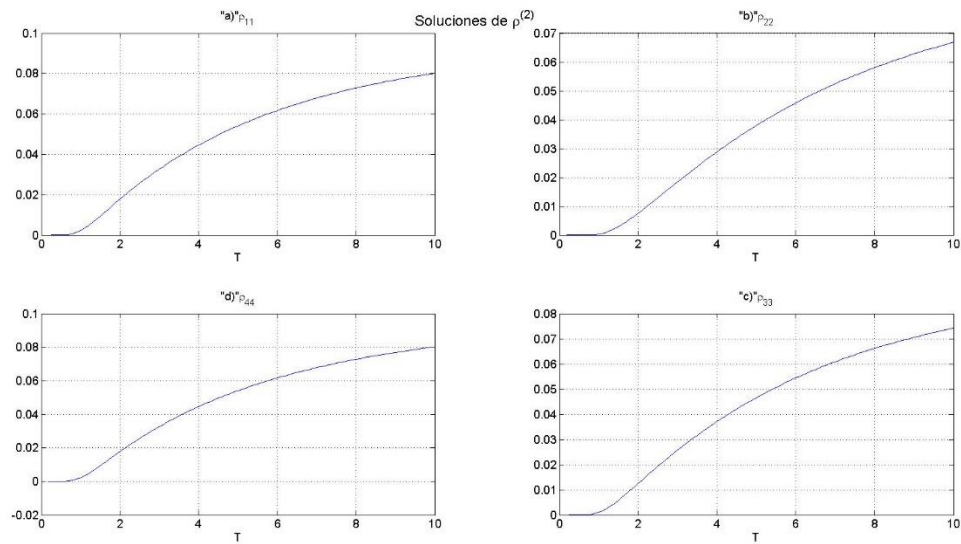


Figura 18. Soluciones de la matriz de densidad de dos electrones como función de la temperatura para a) estado $|a_2^2\rangle$, b) estado $|a_2^2\rangle$, c) estado $|a_3^2\rangle$ y d) para el estado $|a_4^2\rangle$

En la figura 18 se observan las soluciones de la matriz de densidad cuando tenemos dos electrones dentro del sistema, se observa que las figuras 18 a) y d) son las que tiene el valor mayor a temperaturas altas.

Al tener las soluciones de la matriz de densidad en equilibrio para cero, uno y dos electrones, procedemos a hacer el cálculo de las propiedades de interés. Se comienza con las poblaciones de los estados.

7.1.1. Poblaciones (probabilidad de ocupación)

Estas figuras son las poblaciones del sistema en cada uno de los puntos cuánticos, donde las poblaciones implican la probabilidad de que el estado este ocupado.

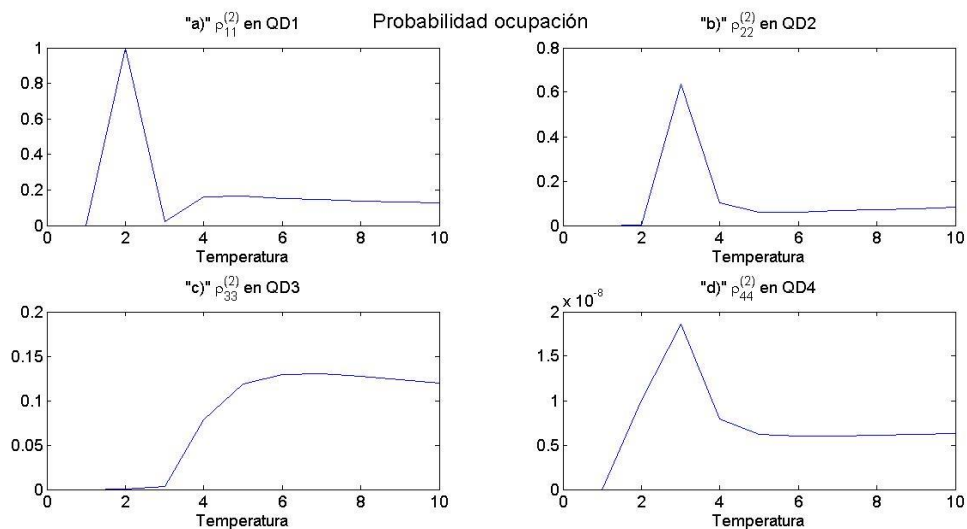


Figura 19. Se grafican las probabilidades de ocupación de la matriz de densidad de dos electrones.

En la figura 19 se observan los cambios en la probabilidad de ocupación, dando énfasis que para el QD4 tiene la menor probabilidad de ocupación, mientras el QD1 está poblado durante un periodo del aumento en la temperatura y después va bajando su ocupación para darle probabilidad de existir a los puntos QD2 y QD3

Habiendo calculado las poblaciones, se procede a realizar los cálculos de las correlaciones cuánticas, la concurrencia y la discordia. Donde estas correlaciones son aquellas que caracterizan al modelo de puntos cuánticos que se tiene.

7.1.2. Correlaciones: Concurrencia y Discordia

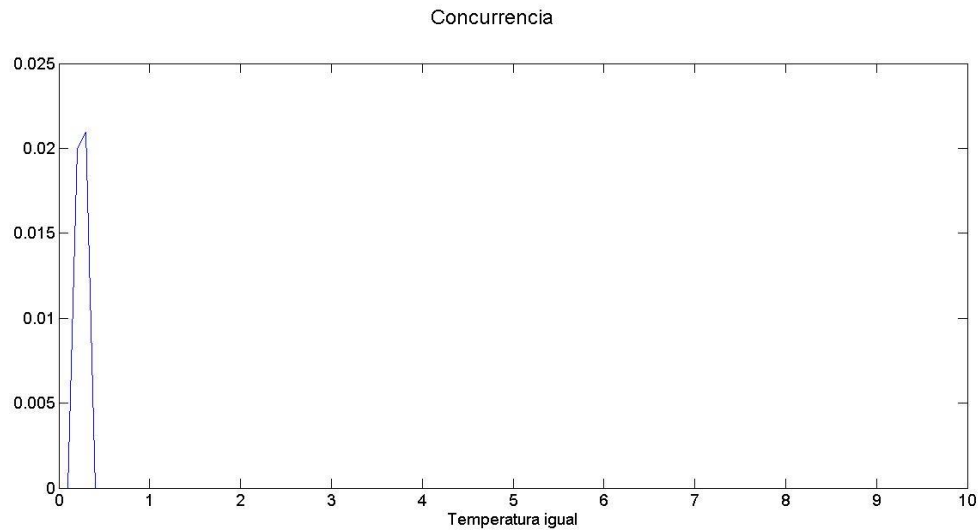


Figura 20. La concurrencia como función de la temperatura

Se muestra la figura 20 la de concurrencia para el sistema cuando las temperaturas de los reservorios son iguales, se observa que el valor de la concurrencia es distinto de cero solo para valores menores que 0.5 de la temperatura. Analizando la figura 20 podemos inferir que la concurrencia no afecta de manera importante al sistema cuando se tienen las temperaturas de los reservorios iguales.

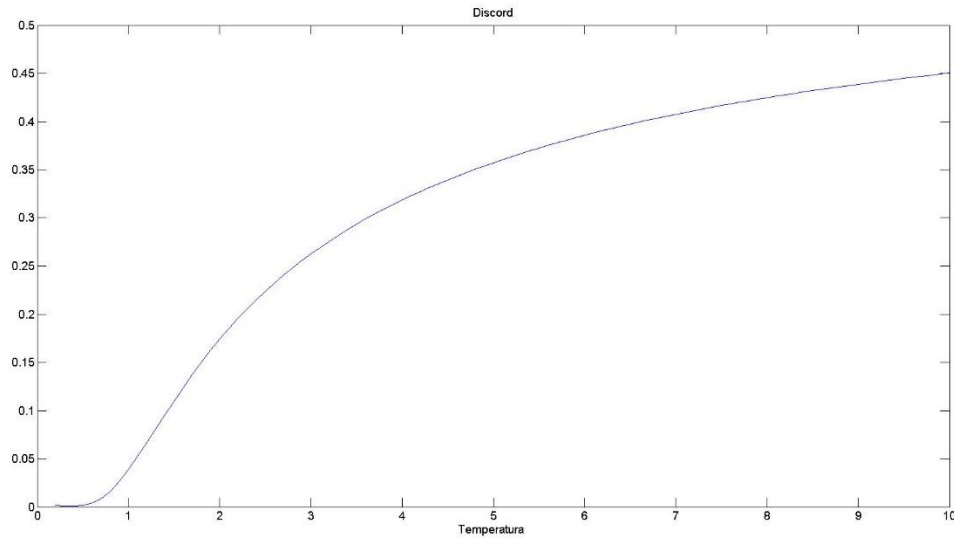


Figura 21. Discordia cuántica contra la temperatura

En la figura 21 se observa como el valor de la discordia va creciendo a medida que la temperatura se va incrementando, es decir hay una generación de esta no clasicidad.

7.2. Maquina térmica con tres temperaturas

Los resultados se obtienen para la matriz de densidad de uno y dos electrones en dos casos, el primero con las energías de sitio distintas y el segundo caso con las energías de sitio iguales y con valor cero. Para primer el caso de energías diferentes se utilizan los parámetros siguientes: las energías de los sitios se ponen con los siguientes valores $\epsilon_1 = 2.1$, $\epsilon_3 = 2.9$, $\epsilon_4 = 4$ y $\epsilon_2 = \epsilon_1 + \epsilon_3 - \epsilon_4$, el valor del potencial químico es de 0.9792 eV, el potencial coulombiano diagonal de 2, el otro potencial (perpendicular) se le da el valor de 12, el valor de la temperatura de los reservorios de referencia es de 2 y por ultimo para el valor del túnel es de 0.1 eV.

Para el segundo caso las energías de sitio iguales los valores que se le dieron a las energías son de $\epsilon_1 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = \epsilon_2 = 0$, el valor del tunelamiento fue de -0.1 eV, para el potencial colombiano diagonal y perpendicular se mantienen con los mismos valores (2 y 12 respectivamente), el valor del potencial químico se establece en -0.1eV y la temperatura del reservorio de referencia es de 2.

Para ambos casos se obtienen las ocupaciones de sitio para cero, uno y dos electrones en el sistema, en forma tridimensional y mapas de contorno como función de las temperaturas T_H y T_C . Además de las propiedades térmicas de interés (P_A): que son la energía promedio (E), las corrientes para cada uno de los sitios (J), las correlaciones cuánticas: la discordia cuántica (D) y la concurrencia (C).

Para poder establecer una posible relación entre las propiedades térmicas de interés, las probabilidades de ocupación como función de las temperaturas T_H y T_C . Se realiza un análisis de forma paramétrica de estas propiedades contra la discordia en de la forma siguiente:

$P_A(T_H)$ vs $D(T_H)$ para la temperatura caliente (H).

$P_A(T_C)$ vs $D(T_C)$ para la temperatura fría (C).

7.2.1. Resumen de resultados importantes

Al realizar un análisis de resultados en ambos casos de energías de sitio, observamos que la discordia cuántica es la propiedad principal en las correlaciones cuánticas y que la concurrencia, midiendo la no separabilidad es una propiedad marginal del sistema. Por lo tanto, el análisis de presentación de nuestros resultados los enfocamos en esta propiedad y la relación con las variables térmicas y probabilidades de ocupación.

Para el caso de energías diferentes se presenta, la discordia es máxima, en regiones donde la temperatura T_C y T_H tienen los valores mayores. El análisis de las poblaciones muestran que aquellas que dan origen al máximo en la discordia son los estados ocupados $|1100\rangle$, $|0101\rangle$ y $|1010\rangle$ (sitios QD1 y QD2 ocupados, sitios QD2 y QD4 ocupados y QD1 y QD3 ocupados respectivamente). Estos tres estados ocupados muestran un comportamiento lineal (los dos primeros decrecientes y el tercero decreciente) cuando se parametrizan con la temperatura T_C .

El estado $|1010\rangle$ se presenta un máximo local cuando parametrizamos contra T_H , mientras que el estado $|1100\rangle$ presenta un comportamiento lineal decreciente cuando la población es mayor de 0.2, para el estado $|0101\rangle$ presenta un comportamiento lineal creciente en la parametrización de T_H .

Las corrientes de sitio presentan una forma lineal creciente cuando se parametrizan con la temperatura T_H , mientras que, para la parametrización de T_C , presenta un comportamiento decreciente y casi lineal en la corriente del sitio 1, mientras que para la corriente 3 se tiene un comportamiento lineal y creciente.

Para el caso donde las energías son iguales y con valor cero, se observa que la discordia presenta también una región máxima cuando la temperatura T_H tiene su valor máximo y la temperatura T_C es baja. Analizamos, de la misma manera cuales son las poblaciones dan origen a este máximo de discordia, y se observa que este máximo es provocado por una mezcla estadística de los cuatro estados de dos electrones.

Se analiza los comportamientos de los cuatro estados de forma paramétrica con la temperatura caliente y obtenemos que los estados $|1100\rangle$ (sitios QD1 y QD2 ocupados) y $|1010\rangle$ (sitios QD1 y QD3 ocupados) presentan un comportamiento casi constante, mientras los estados $|0101\rangle$ (sitios QD2 y QD4 ocupados) y $|0011\rangle$ (sitios QD3 y QD4 ocupados) tienen una forma lineal pero decreciente. En la parametrización de la temperatura fría para los estados $|1100\rangle$ y $|1010\rangle$ se observa que el comportamiento decreciente con forma lineal, pero existe un punto donde este decrecimiento se vuelve más rápido. Para los estados $|0101\rangle$ y $|0011\rangle$ se tiene un comportamiento lineal y creciente y presenta también un punto donde el crecimiento se vuelve más rápido. Para las corrientes de sitio en función de la discordia presentan una forma lineal creciente todas excepto la corriente del sitio 3 que es decreciente, tienen el mismo comportamiento, pero un valor en la pendiente diferente dependiente de T_H

También realizamos el cálculo de la energía promedio del sistema de manera tridimensional y en mapa de contorno, además de hacer el análisis de manera paramétrica para la temperatura fría. Esta propiedad si bien es importante, no es en la que el análisis esta enfoca, sino en la posible relación de las corrientes por sitio con la discordia cuántica.

7.2.2. Energías de sitio distintas

A continuación, se presentan los resultados de las propiedades en forma de gráficas en tres dimensiones y mapas de contorno. Consideramos la discordia cuántica y las probabilidades de ocupación en función de las temperaturas caliente y fría. Después realizamos el análisis de las poblaciones donde la discordia cuántica presenta su valor máximo, para evaluar cuáles son las que contribuyen al aumento de las correlaciones y finalmente se realizan graficas paramétricas con las temperaturas y también contra la discordia cuántica, para establecer su posible relación.

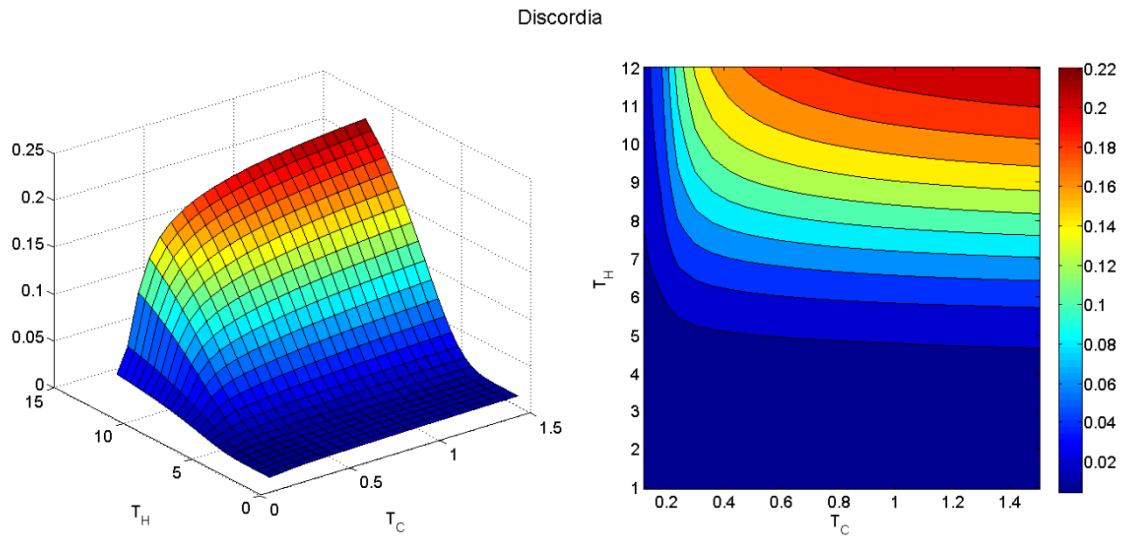


Figura 22 Discordia cuántica como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

En la figura 22 presentamos el comportamiento de la discordia cuántica en función de las temperaturas T_H y T_C , donde podemos observar que esta propiedad cuántica aumenta cuando las dos temperaturas están en su máximo valor, y va decayendo a medida que bajan los valores de las temperaturas. Se observa que el valor de la discordia es máximo cuando el rango de la temperatura T_C está entre 0.6 y 1.5 y T_H se encuentra entre 8 y 12.

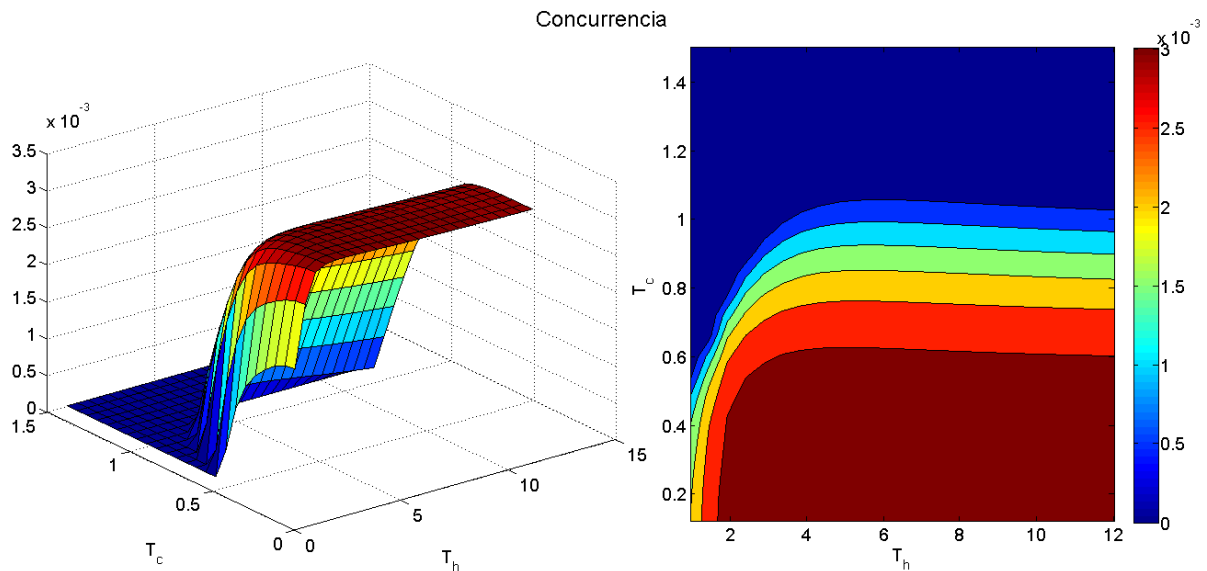


Figura 23 Concurrencia en función de la temperatura fría y caliente.

En contraste en la figura 23, presentamos la concurrencia en función de los mismos rangos de temperaturas fría y caliente, se puede observar como la concurrencia (propiedad que mide la no separabilidad de los estados) no tiene un valor relevante, ya que su máximo valor se encuentra cercano a cero (10^{-3}), lo que implica que en nuestro sistema no se ve afectado por la presencia de esta correlación cuántica e implica que es una propiedad marginal para nuestro modelo.

Ahora analizaremos cuáles son los estados que están dando origen a la discordia cuántica, esto a partir del cálculo de las probabilidades de ocupación para los estados donde tenemos dos partículas dentro del sistema.

En el sistema se tienen 9 estados, no electrones, estados de un electrón y estados de dos electrones. Como estamos interesados en las propiedades de correlación, aquí presentamos las poblaciones para los estados de dos electrones, y por completos en el apéndice C presentamos las poblaciones de no electrones y un electrón.

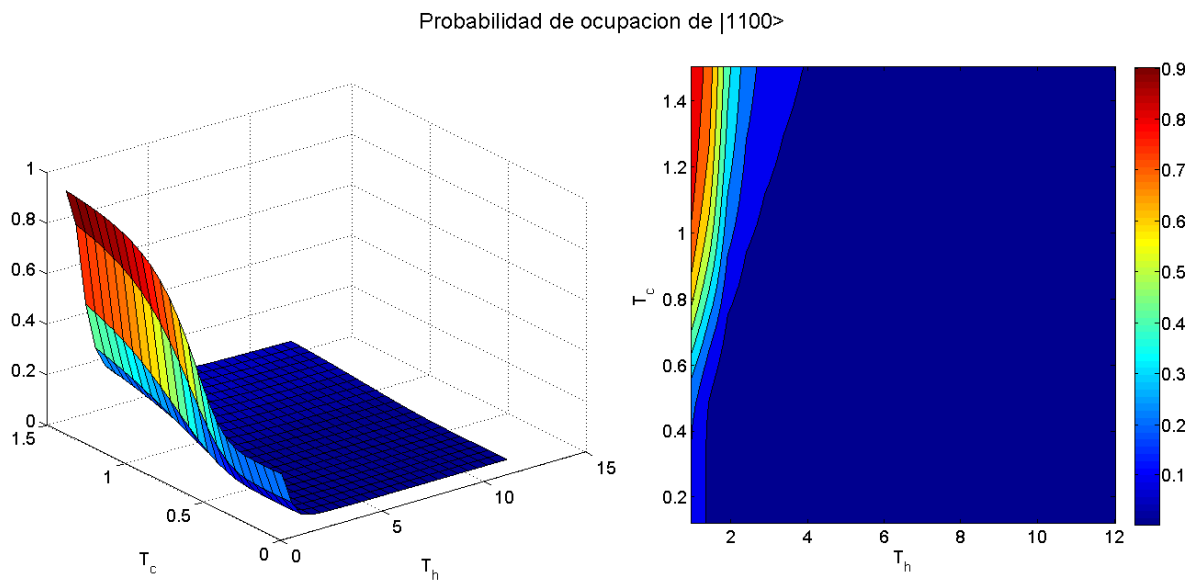


Figura 24 Probabilidad de ocupación de QD1 y QD2 como función de T_h y T_c . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(2)}$.

En la figura 24 presentamos la probabilidad de ocupación en el QD1 y QD2 como función de la temperatura caliente y fría. Esta población toma el valor máximo posible (uno) cuando la temperatura fría es menor a tres, y la temperatura caliente tiene un valor mayor a 0.6.

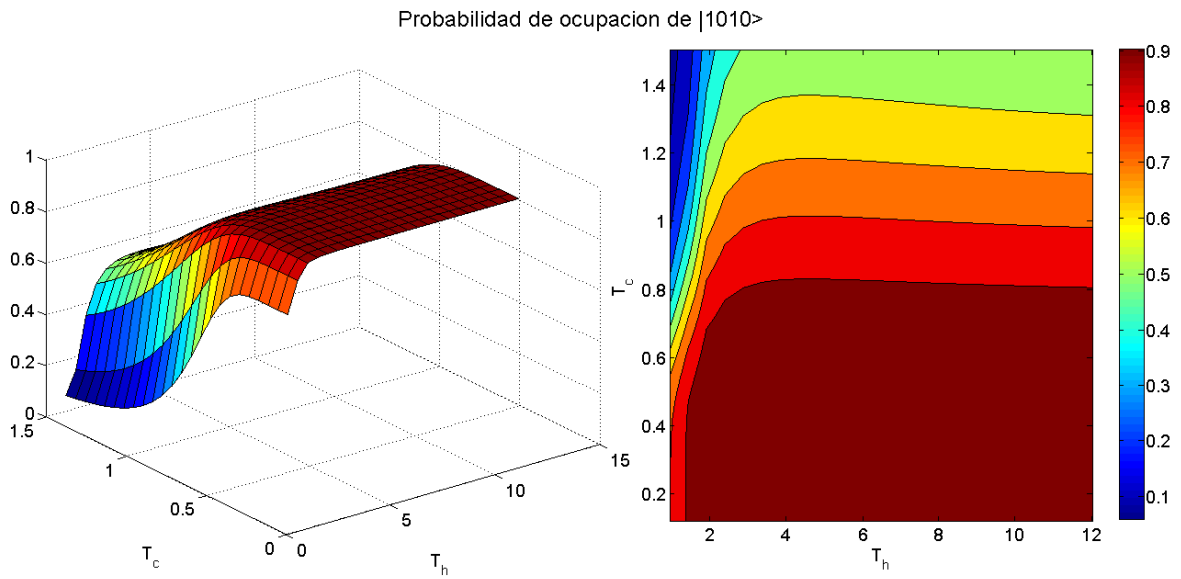


Figura 25 Probabilidad de ocupación de QD1 y QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el segundo estado de $\rho^{(2)}$.

En la figura 25 presentamos la población para el estado (QD1 y QD3 ocupados). El cual llega a su máximo de ocupación cuando la temperatura fría es menor a 0.8 para cualquier valor de T_H .

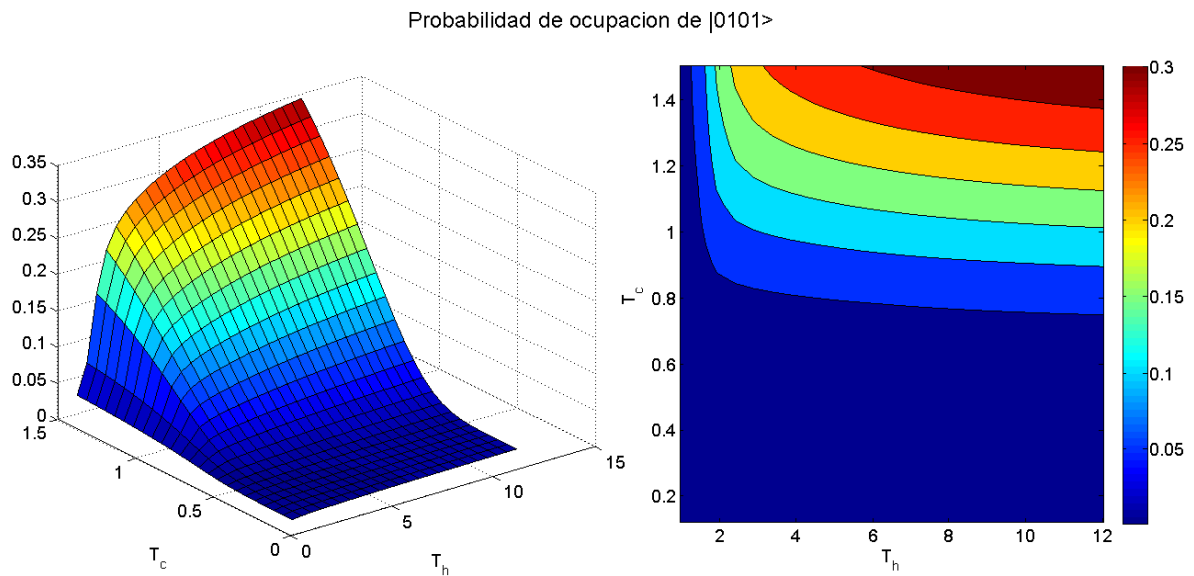


Figura 26 Probabilidad de ocupación de QD2 y QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el tercer estado de $\rho^{(2)}$.

El análisis de la figura 26 para el estado con ocupación en QD2 y QD4 en función de T_c y T_h , se observa que la ocupación es máxima cuando ambas temperaturas (caliente y fría) tienen su valor máximo, este es el estado que mayor participación tiene en la generación de la correlación de discordia cuántica para el caso de energías de sitio diferentes.

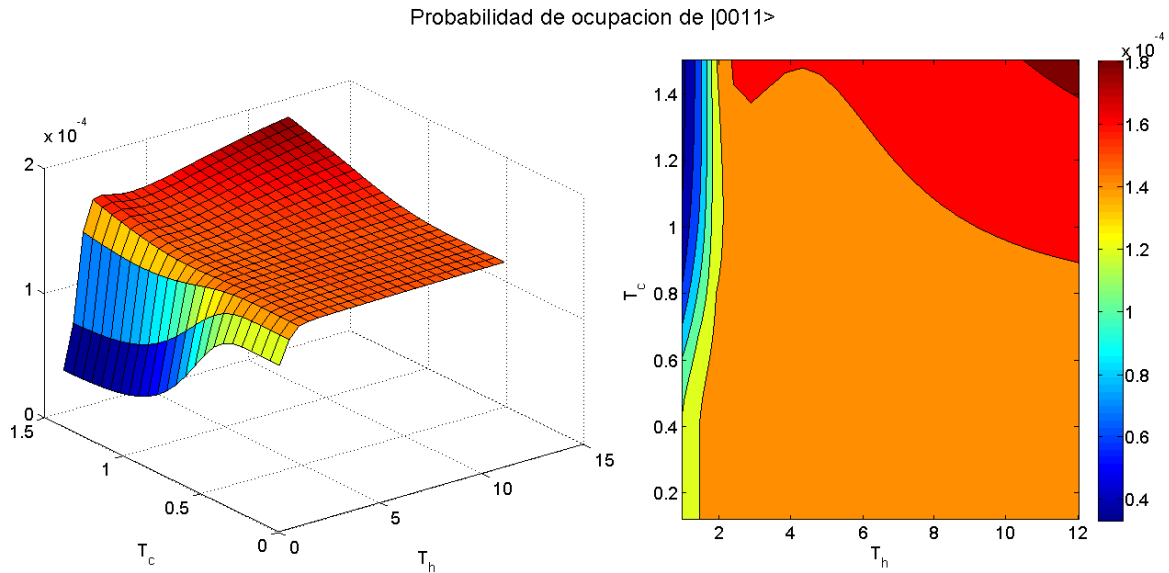


Figura 27 Probabilidad de ocupación de QD3 y QD4 como función de T_h y T_c . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el cuarto estado de $\rho^{(2)}$.

Finalmente viendo a detalle la imagen de la figura 26 para el estado (con QD3 y QD4 ocupados) podemos darnos cuenta la ocupación para cada uno de los estados tiene una probabilidad de ocupación demasiado baja, por lo que implicamos que el estado participara muy poco en las propiedades de correlación.

Se realiza un análisis de las poblaciones en esta región de temperaturas para observar cuales son las que involucran el comportamiento máximo de la discordia, y se concluye que los estados son: el estado ocupado por el QD1 y QD2 ($|1100\rangle$), con poca ocupación, el estado ocupado por QD2 y QD4 ($|0101\rangle$) y el estado ocupado por el QD1 y el QD3 ($|1010\rangle$) con una ocupación apreciable y dominante.

Después de analizar estas graficas podemos implicar el siguiente proceso, el cual nos va a generar el máximo en la discordia cuántica: entrada del estado $|1100\rangle$, para luego generarse un intercambio entre los estados $|1010\rangle$ y $|0101\rangle$, en este caso la población que se mantiene con más presencia es la del estado $|1010\rangle$.

Para realizar un análisis más completo de estos tres estados, procedemos al análisis de estos tres estados mediante la parametrización de ambas temperaturas T_h y T_c de manera separada, esto significa que

tomamos una temperatura (primero T_C y después de manera separada T_H) como variable y a la otra temperatura (T_H y después T_C) se le dan valores específicos (dentro del rango elegido) y observamos el comportamiento de la población contra la discordia y contra la temperatura usada como variable (T_C).

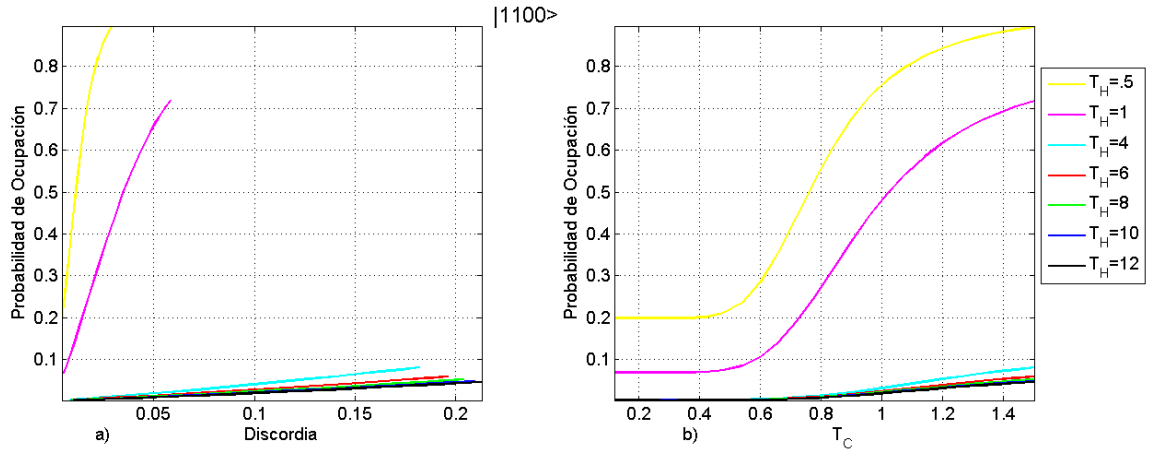


Figura 28. Probabilidad de ocupación para el primer estado QD1 y QD2 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H

En la figura 28 se muestran las ocupaciones contra discordia y temperatura fría del estado de dos electrones $|1100\rangle$ este estado implica tener un electrón en el sitio QD1 y QD2. En la figura 28 a) vemos que el comportamiento es lineal para las temperaturas T_H , y a temperaturas T_H bajas se tiene una mayor ocupación que cuando las temperaturas calientes son altas, mientras que para mayor valor de discordia la ocupación tiene una tendencia a subir de manera lineal, donde la pendiente disminuye con el aumento de la temperatura caliente. Por ultimo en la gráfica 27 b) se observa que a mayor temperatura fría se tiene mayor ocupación, más afectada la ocupación cuando tenemos T_H baja.

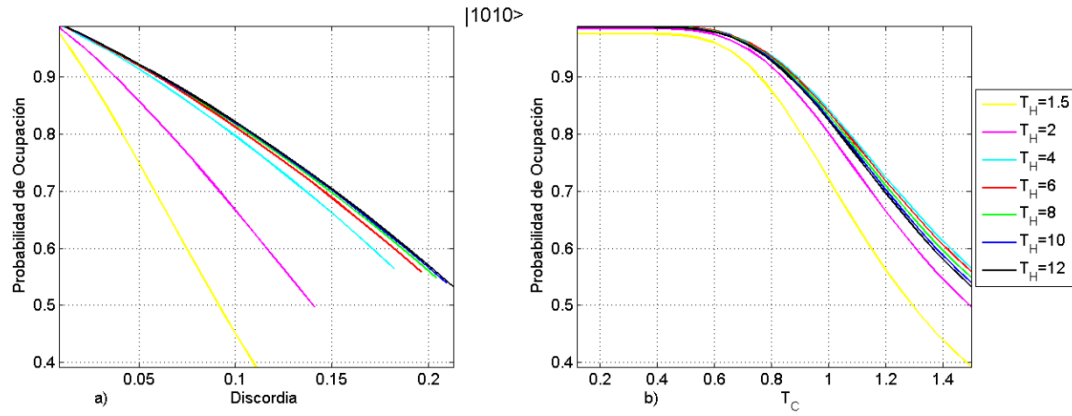


Figura 29. Probabilidad de ocupación para el segundo estado QD1 y QD3 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H

En la figura 29, para las probabilidades para el estado $|1010\rangle$ el cual implica un electrón en el sitio QD1 y otro en el sitio tres QD3. En la figura 29 a) se observa como a mayor discordia la ocupación del estado es menor y tiene un decaimiento lineal para valores de discordia menores a 0.8. En la gráfica 28 b) se resalta que el comportamiento es casi idéntico para las diferentes temperaturas calientes, aunque para la menor de ellas el decaimiento es ligeramente mayor para temperaturas T_C altas.

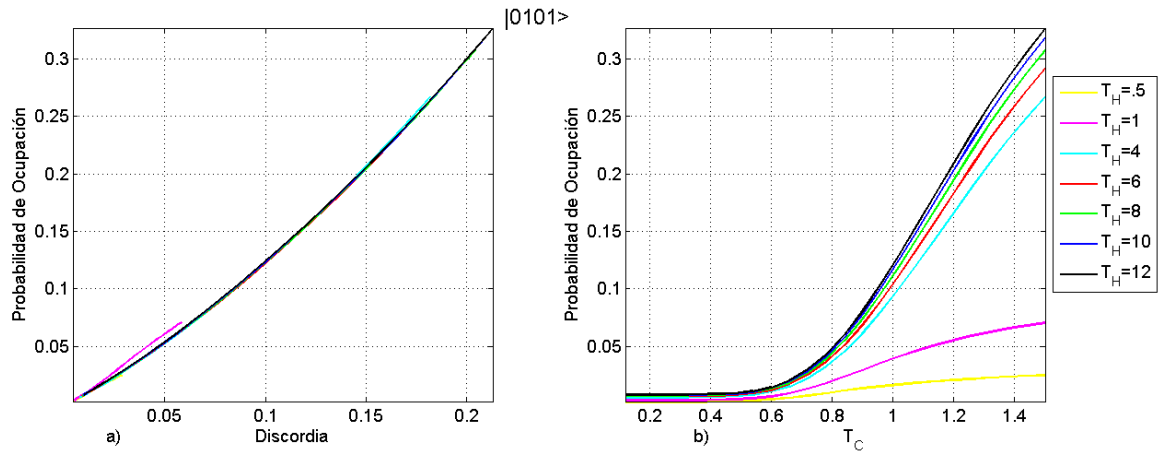


Figura 30 Probabilidad de ocupación para el segundo estado QD2 y QD4 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H

En la figura 30 se presenta la población del otro estado fuera de la diagonal ocupado en QD2 y QD4 en función de la discordia y la temperatura fría, (a)) se tiene un comportamiento lineal (pendiente positiva) e

independiente de la temperatura caliente que elijamos, en b) se observa como a mayor temperatura fría se tiene un mayor valor de la ocupación

Se procede ahora a realizar el cálculo de las ocupaciones parametrizando la temperatura fría y dejando como variable la temperatura caliente.

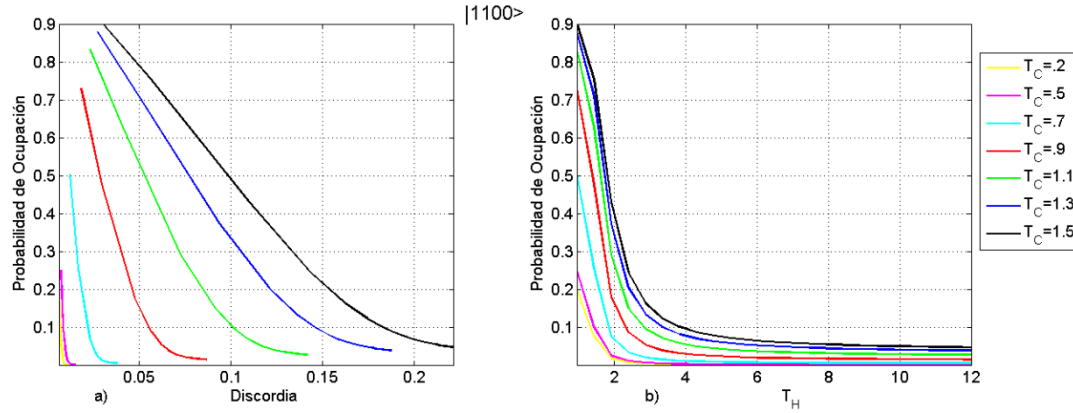


Figura 31 Probabilidad de ocupación para el primer estado QD1 Y QD2 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_H para diferentes valores de T_C .

En la figura 31 se tiene el estado $|1100\rangle$ el cual implica tener el sitio QD1 y QD2 ocupados, se observa como la probabilidad de ocupación decae y la velocidad de este decaimiento es proporcional a la discordia, además de que entre mayor sea T_C más lento será el decaimiento, para la gráfica b) se tiene un decaimiento en la ocupación de manera similar para los diferentes valores de la temperatura T_C .

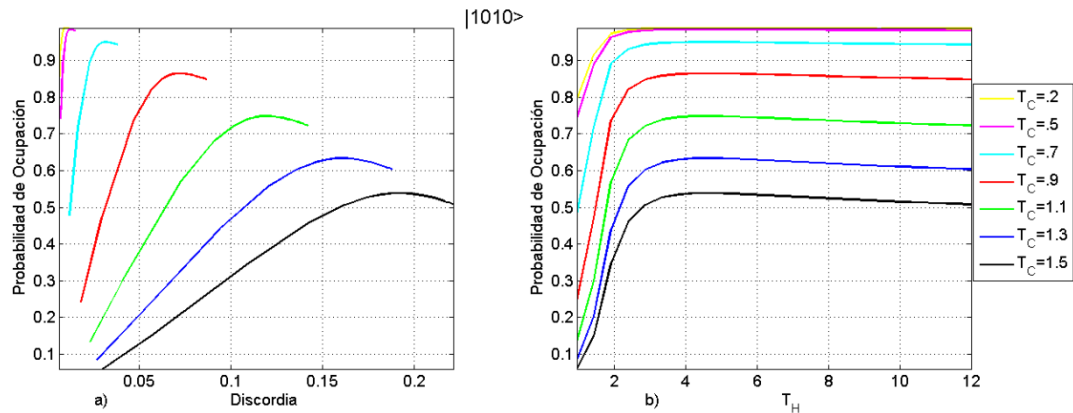


Figura 32 Probabilidad de ocupación para el segundo estado QD1 Y QD3 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_H para diferentes valores de T_C .

En la figura 32 se tiene el cálculo de la probabilidad de ocupación para el estado donde tenemos un electrón en QD1 y otro en QD3. Se observa que para el estado $|1010\rangle$ se tiene una probabilidad de ocupación que va subiendo, llega a un máximo y luego decae de una manera suave, observamos también que esto ocurre cuando la temperatura caliente es menor, ya que al aumentar esta temperatura el sistema llega a un equilibrio y no hay variaciones de ocupación.

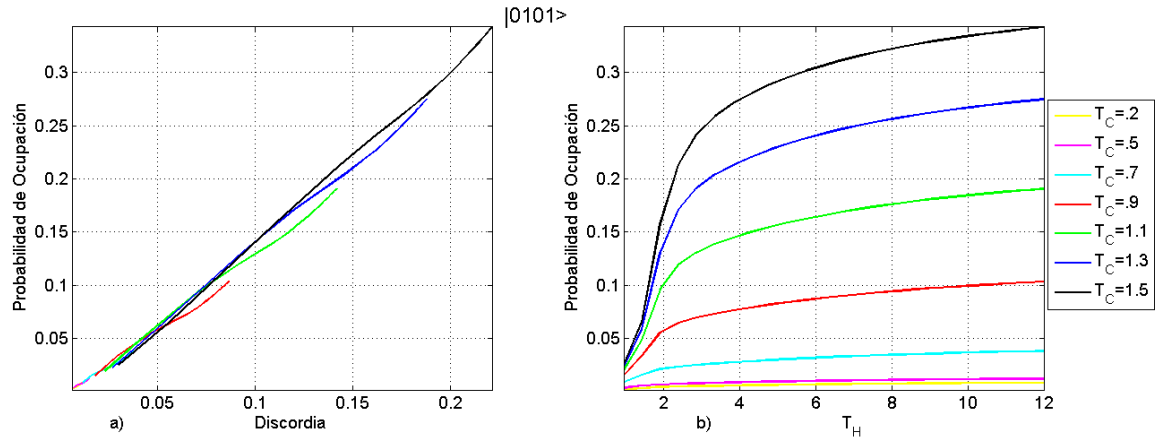


Figura 33 Probabilidad de ocupación para el segundo estado QD2 Y QD4 de $\rho^{(2)}$ como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_H para diferentes valores de T_C .

En la figura 33 se presenta el estado ocupado por los sitios QD2 y QD4, donde se observa que la probabilidad de ocupación contra la discordia tiene un comportamiento casi lineal, y creciente, y presenta poca dependencia con la temperatura caliente.

Por lo que podemos observar un comportamiento casi lineal de la población en función de la discordia cuando se parametrizan con T_C , pero un comportamiento no lineal en la parametrización de T_H .

Por lo que nos concentraremos en relaciones de interés y que estudiaremos cuando se parametriza $P(T_C)$ vs $D(T_C)$

7.2.3. Corrientes de calor por sitio

Continuamos con el análisis de las corrientes de calor en el sistema siguiendo un esquema similar que la discordia: primero de forma tridimensional y con mapas de contorno, para después hacer el análisis de manera paramétrica con T_C y T_H (igual que con las poblaciones), esto para poder determinar la relación con la discordia y la corriente térmica, que como se había mencionado puede ser lineal

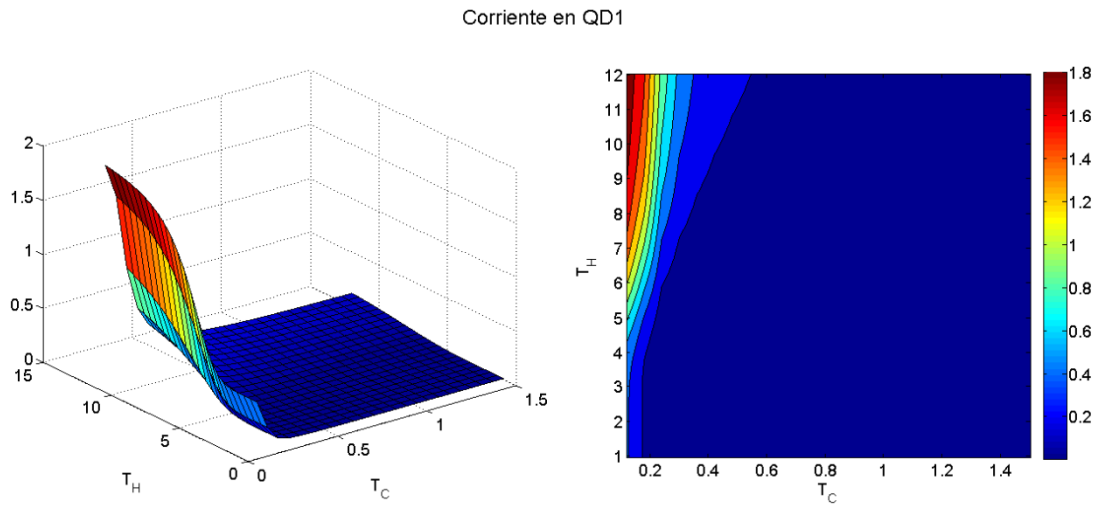


Figura 34 Corriente de calor para el sitio QD1 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

En la figura 34 para la corriente en el punto cuántico 1 en función de las temperaturas fría y caliente, observamos que solo tenemos corriente para valores grandes de la temperatura caliente y al mismo tiempo valores muy bajos para la temperatura fría, y esto en una región muy pequeña, o en otras palabras la corriente existe de manera muy limitada. Recordemos que este sitio es el que tiene la temperatura de referencia.

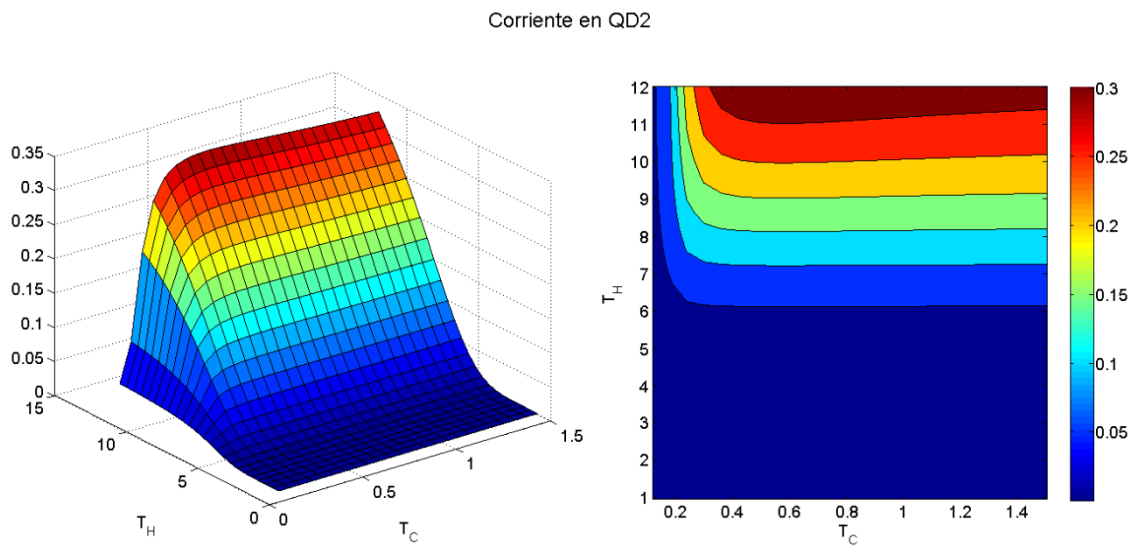


Figura 35 Corriente de calor para el sitio QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

Continuamos con la corriente en el sitio QD2 (esta corriente está asociada con el reservorio a temperatura T_C), que se presenta en la figura 35 como función de T_C y T_H . En este punto es donde se asocia la temperatura T_C con el comportamiento de la corriente, la cual es mayor en la región con temperatura T_H desde 6 a 12, mientras que para la temperatura fría la corriente se mantiene constante, a partir de una temperatura T_C de 0.4, antes de este valor la corriente es muy pequeña. Vemos un comportamiento cualitativamente muy parecido al de la discordia cuántica (figura 22)

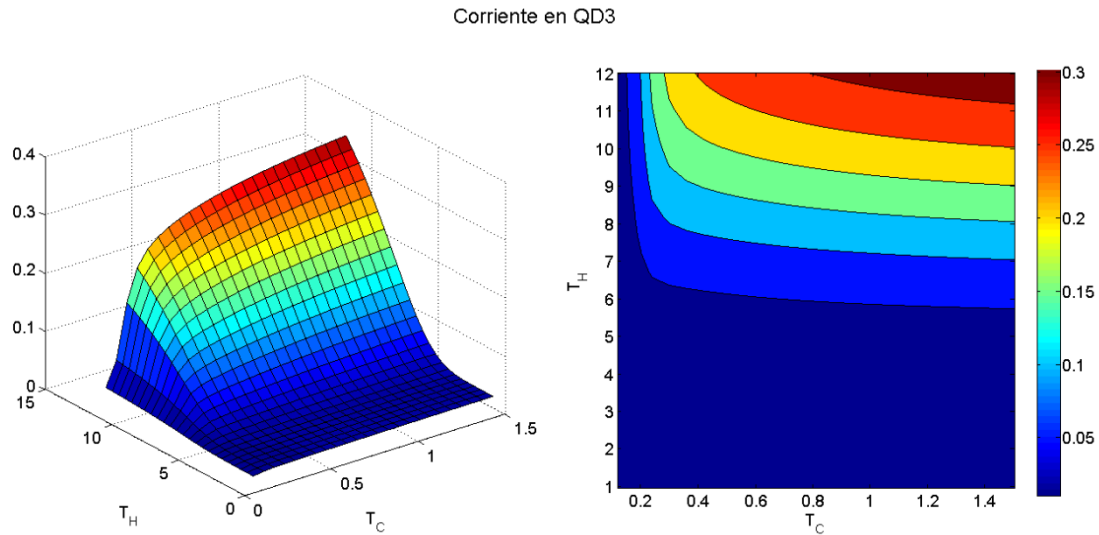


Figura 36 Corriente de calor para el sitio QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

En la figura 36, presentamos la corriente para el sitio QD3 (temperatura de referencia), donde vemos que el comportamiento es similar a la corriente del punto cuántico 2, donde vemos que la corriente pequeña para T_H pequeñas en toda la región de T_C para luego mantenerse de una manera casi constante a temperaturas grandes.

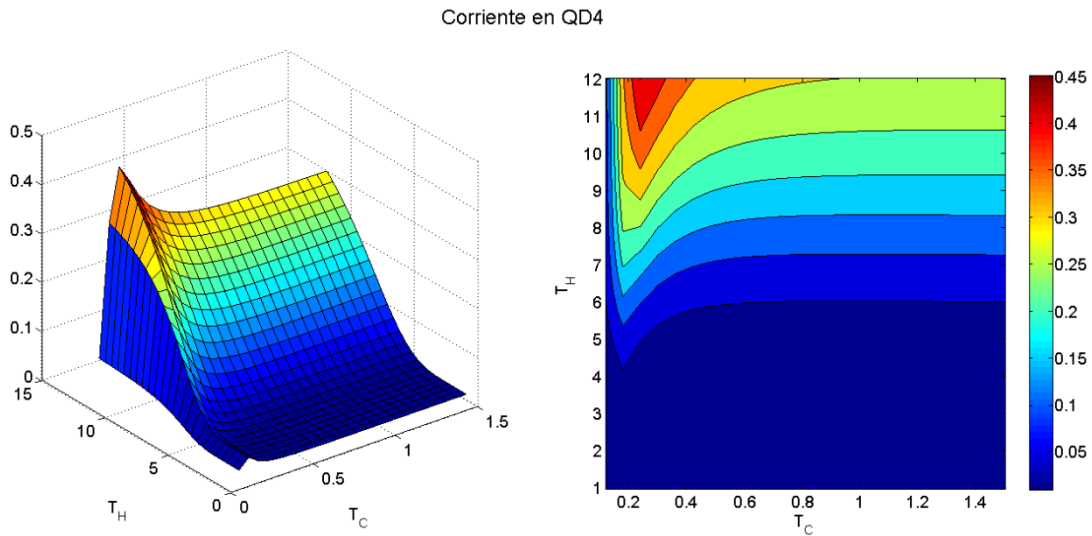


Figura 37 Corriente de calor para el sitio QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

Finalmente, en la figura 37 para el QD4 (asociado con T_H) observamos un comportamiento diferente al de los otros puntos, que se tiene que la corriente tiene un máximo para temperaturas calientes grandes y luego va decayendo, lo que implica que tenemos un cambio interesante en el sistema y una relación de T_H vs T_C con un máximo local de corriente por este punto para una T_C

Tratemos ahora de relacionar ambas propiedades haciendo una curva paramétrica de corriente contra discordia, es decir, $J_{QDi}(T_C)$ vs $D(T_C)$, para los $i=1,2,3$ y 4 sitios, y las curvas $J_{QDi}(T_H)$ vs $D(T_H)$, usando T_H

Estas relaciones de parametrización y el análisis geométrico de estas relaciones se muestran en las tablas 1 y 2 de manera sintetizada. Primero en la tabla 1 se muestra la parametrización de T_C , y después en la tabla 2 la de T_H . Con este enfoque podemos analizar la dependencia de las corrientes de manera más sencilla como función de la cantidad de correlaciones cuánticas presentes en el sistema a diferentes temperaturas (caliente o fría)

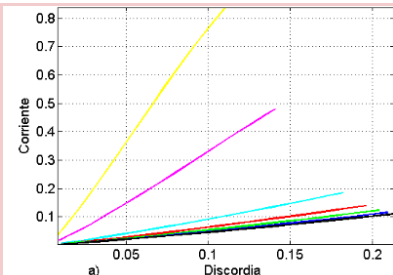
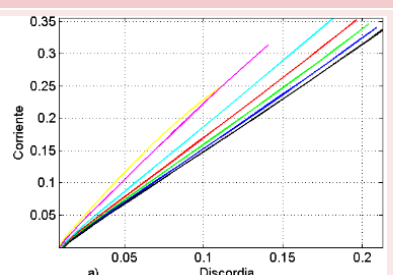
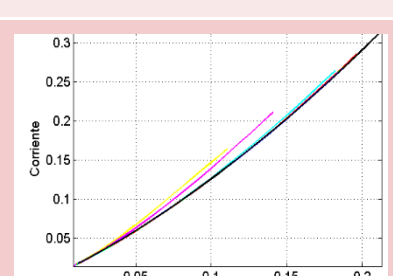
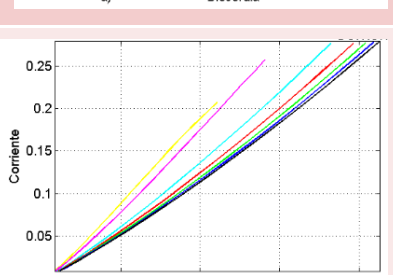
Corriente de sitio	Parametrización con T_C	Gráfica de corriente vs discordia
J_{QD1}	Forma línea con tendencia a crecer $J_{QD1}(T_C)$ vs $D(T_C)$	
J_{QD2}	Lineal creciente pendientes con poco dependientes de T_H $J_{QD2}(T_C)$ vs $D(T_C)$	
J_{QD3}	Lineal creciente pendientes con poco dependientes de T_H $J_{QD3}(T_C)$ vs $D(T_C)$	
J_{QD4}	Lineal creciente $J_{QD4}(T_C)$ vs $D(T_C)$	

Tabla 1 Corrientes de sitio J_{QDi} en función de la discordia parametrizadas con la temperatura T_C . sitio 1 primer renglón, sitio dos el segundo renglón, sitio tres el tercer renglón y sitio 4 el cuarto renglón. Para temperaturas específicas de T_H

En la tabla 1, se observa que para todas las corrientes en los sitios se tiene un comportamiento lineal (J_{QD1} y J_{QD2}) o casi lineal (J_{QD3}) con la discordia y además se observa que todas las gráficas comienzan en cero lo que implica que la corriente y la discordia tienen una relación directa, esto es, que la corriente que se origina viene solo de los estados ocupados por dos electrones, que sin los estados que dan origen de las correlaciones cuánticas existentes en el sistema.

Por lo tanto, de este análisis encontramos una relación lineal que intersecta en cero al eje de la discordia en cero, esto implica que la corriente que se tiene es consecuencia de los estados de dos partículas que tienen discordia cuántica. Este es un resultado clave en nuestro trabajo y apoya la hipótesis de la relación entre las propiedades y además en una relación lineal. Otro punto interesante a resaltar es el hecho de que las gráficas son univalueadas, lo que dan pie a que si el modelo se hiciera experimentalmente se puede tener una relación directa y lineal de una propiedad térmica medible con una propiedad cuántica de estados cuánticos con correlaciones como la discordia.

Corriente de sitio	Parametrización con T_H	Gráfica de corriente vs discordia
J_{QD1}	Forma decreciente $J_{QD1}(T_H)$ vs $D(T_H)$	
J_{QD2}	Máximo local $J_{QD2}(T_H)$ vs $D(T_H)$	
J_{QD3}	Forma casi lineal creciente $J_{QD3}(T_H)$ vs $D(T_H)$	
J_{QD4}	Forma c reciente con un máximo local $J_{QD4}(T_H)$ vs $D(T_H)$	

Tabla 2 Corrientes de sitio J_{QDi} en función de la discordia parametrizadas con la temperatura T_H . Sitio 1, primer renglón, sitio dos el segundo renglón, sitio 3 tercer renglón y sitio 4 cuarto renglón para varias temperaturas T_C .

El análisis desde la perspectiva de la parametrización con la temperatura caliente es menos directa.

En la tabla 2, para las corrientes de los sitios se observa que solo se tiene una forma lineal (para la corriente en QD3), un comportamiento casi lineal para para la corriente en QD1, excepto en los máximos de las discordias mientras que para las corrientes en los puntos QD2 y QD4 se presenta un máximo local, mucho más resaltado en el punto QD4.

En esta tabla podemos observar en las gráficas que, si bien se tiene una relación entre la discordia y la corriente térmica, es de forma más compleja que en la tabla 1, ya que no es univaluada. Es decir, para un solo valor de corriente se pueden tener dos valores de la discordia cuántica.

De las tablas 1 y 2 podemos inferir que la temperatura que nos ayuda más al análisis y a encontrar una relación más directa entre las propiedades térmicas y las correlaciones cuánticas es la parametrización con la temperatura fría (T_c), por lo tanto, en el siguiente análisis para energías de sitio iguales nos enfocaremos en ver la parametrización solo con esta temperatura

7.2.4. Energías de sitio iguales

Los resultados de las propiedades de interés para el caso de energías iguales se presentan como en la sección anterior, primero se presentan en gráficas de discordia, concurrencia y poblaciones en tres dimensiones y mapas de color como función de las temperaturas fría y caliente. Después se analiza las poblaciones que contribuyen al aumento en las correlaciones. Y por último se presentan las corrientes de calor por sitio parametrizando la temperatura fría T_c ,

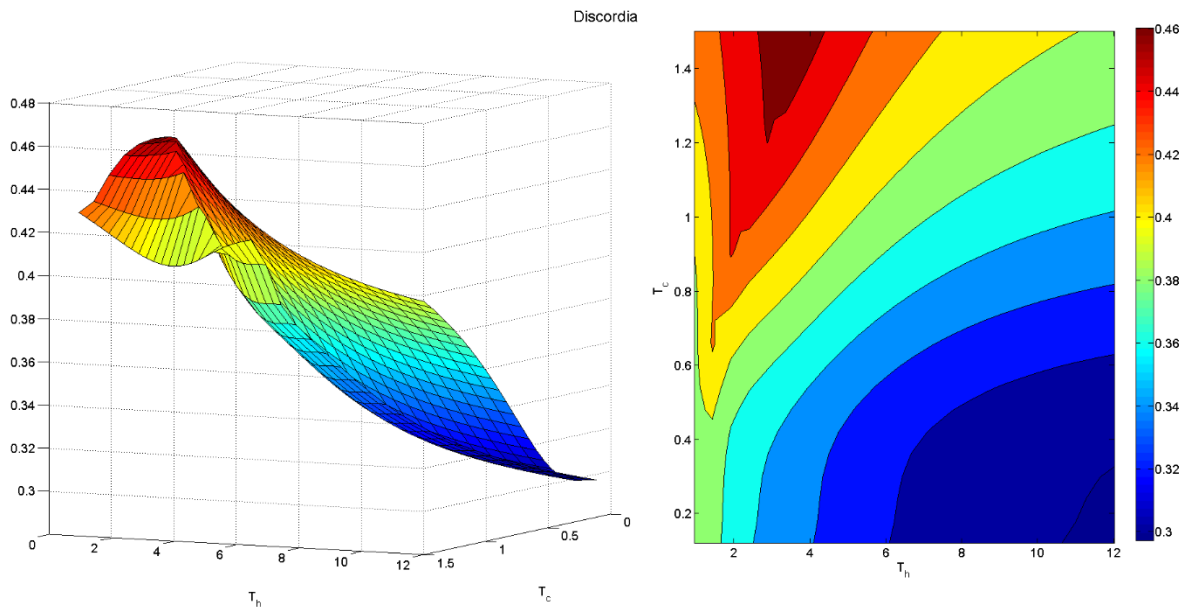


Figura 38 Discordia cuántica como función de las temperaturas T_h y T_c . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

En la figura 38 presentamos como es el comportamiento de la discordia cuántica en función de la temperatura caliente y fría. Esta propiedad presenta un máximo relativo en forma de pico, en la variable T_H , bien caracterizado a temperaturas frías grandes

En este caso, la concurrencia es cero en todas las regiones de temperaturas caliente y frías, este caso toda la propiedad de correlación viene de la discordia. Por lo que podemos establecer que la discordia cuántica en esta máquina térmica es la correlación dominante en estado de equilibrio.

Analizamos cuales son las poblaciones dan origen a este máximo de discordia, y se observa que es una mezcla estadística de los cuatro estados de dos electrones como vemos a continuación.

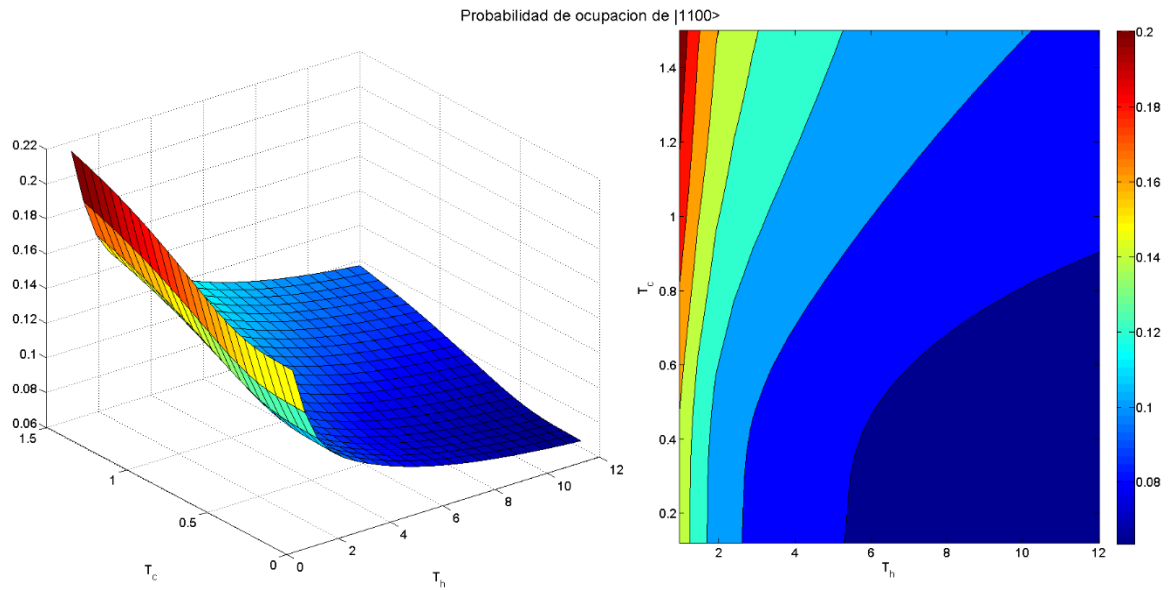


Figura 39 Probabilidad de ocupación en QD1 y QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(2)}$.

Iniciamos con el estado donde tenemos un electrón en QD1 y otro en QD2, mostrado en la figura 39 en función de la temperatura fría y caliente, se tiene una mayor probabilidad de ocupación, cuando la temperatura T_H pequeña y T_C tiene su valor máximo, además se tiene que la probabilidad de ocupación será mayor a lo largo de T_H cuando esta adquiere valores pequeños.

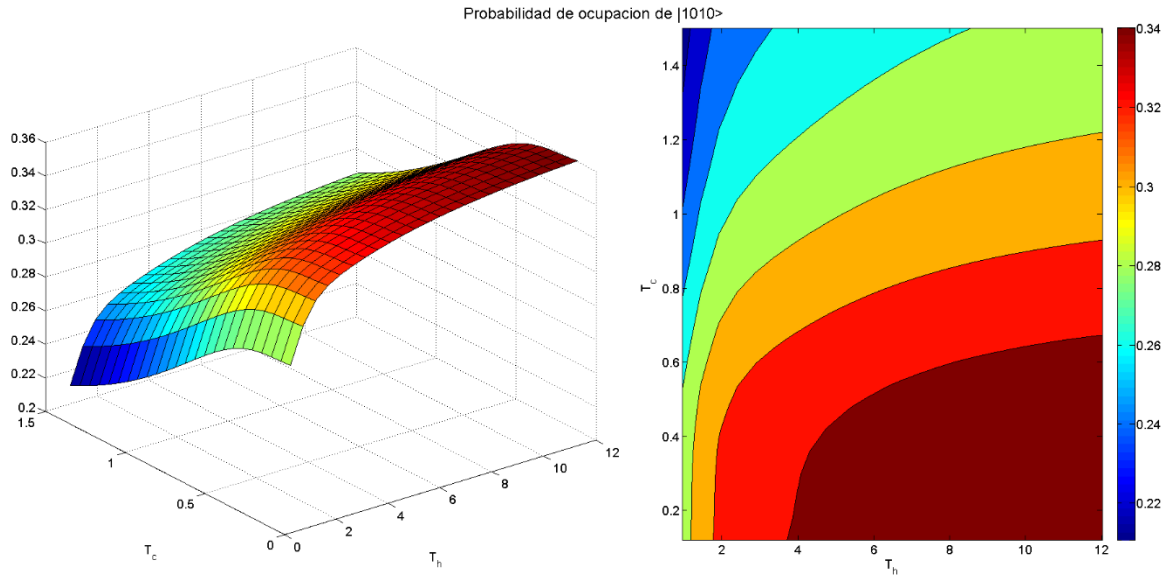


Figura 40 Probabilidad de ocupación QD1 y QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el segundo estado de $\rho^{(2)}$.

En la figura 40 presentamos como son las ocupaciones del estado (QD1 y QD3 ocupados) en función de la temperatura T_H y T_C . Esta presenta alta probabilidad de existir a medida la temperatura caliente tiende a aumentar y la temperatura fría a disminuir.

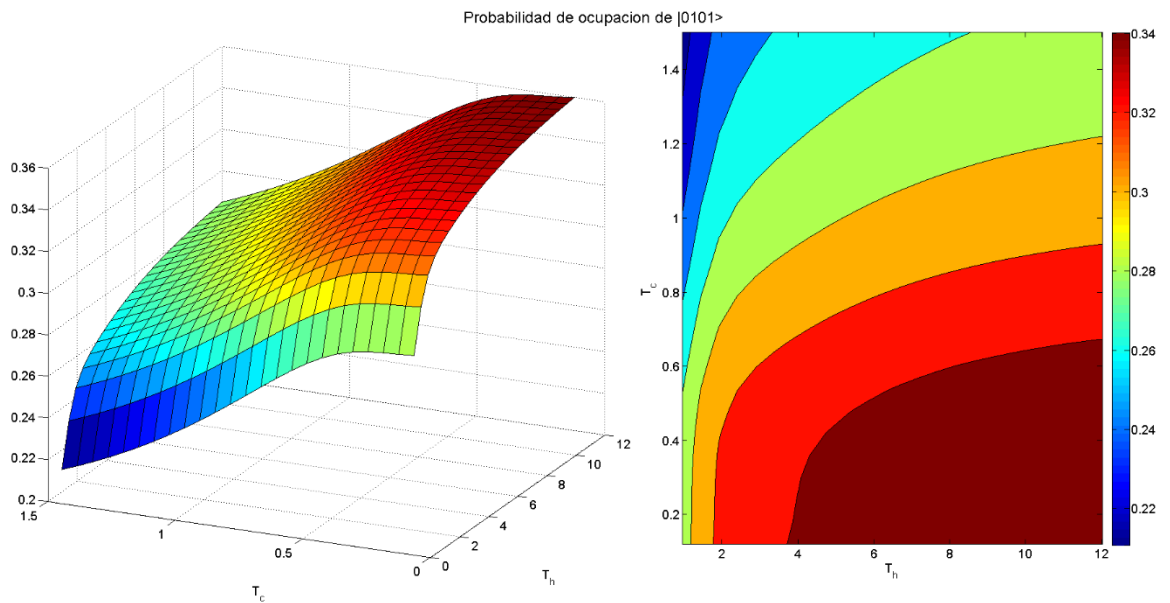


Figura 41 Probabilidad de ocupación de QD2 y QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el tercer estado de $\rho^{(2)}$.

Los resultados para estado donde están ocupados los sitios QD2 y QD4, se presentan en la figura 41 en función de la temperatura fría y caliente, se tiene un comportamiento es prácticamente igual que el estado cuando está ocupado QD1 y QD3 (figura 40).

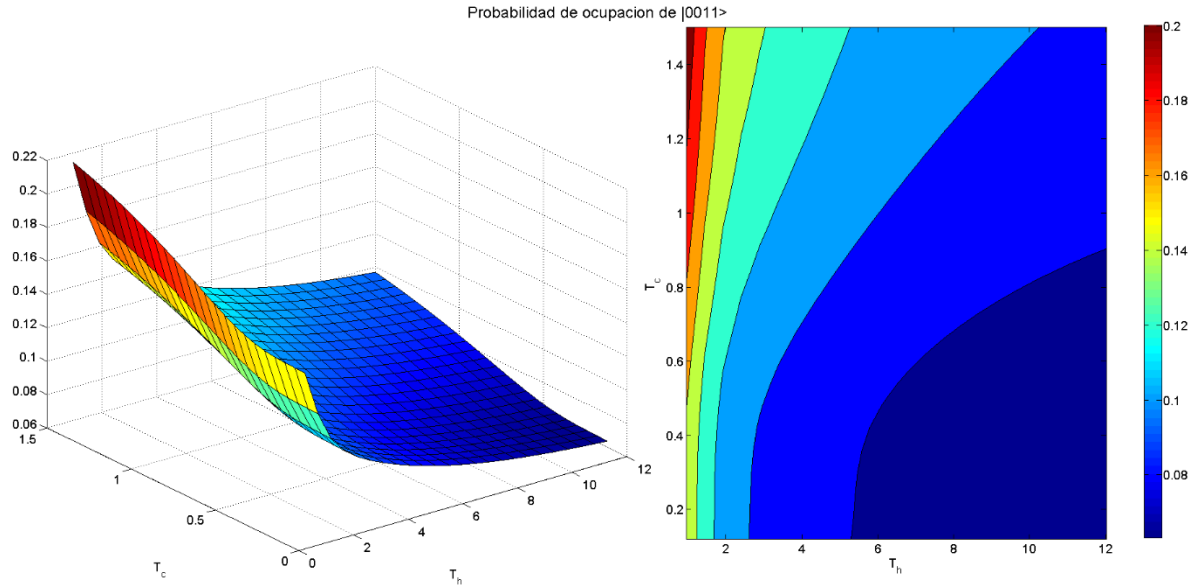


Figura 42 Probabilidad de ocupación de QD3 y QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el cuarto estado de $\rho^{(2)}$.

Finalmente, en la figura 42 se tiene la probabilidad de ocupación del sitio (QD3 y QD4) como función de la temperatura caliente y fría, esta grafica es análoga a la del sitio ocupado por QD1 y QD2.

De estas graficas de poblaciones podemos observar como los estados $|1100\rangle$ y $|0011\rangle$ tienen el mismo valor en poblaciones y forma con respecto a las temperaturas fría y caliente, mientras los estados $|1010\rangle$ y $|0101\rangle$ también lo son y de igual manera se tienen los mismos valores en la ocupación solo que a diferencia del otro par de estados, estos dos últimos tienen mayor probabilidad de existir.

Entonces los cuatro estados están presentes en el valor máximo de la discordia cuántica, dominando los estados con electrones en las diagonales, donde se logra que una población induzca un máximo relativo en la discordia

Ahora se procede a realizar el análisis de los comportamientos estos cuatro estados de forma paramétrica con la temperatura caliente.

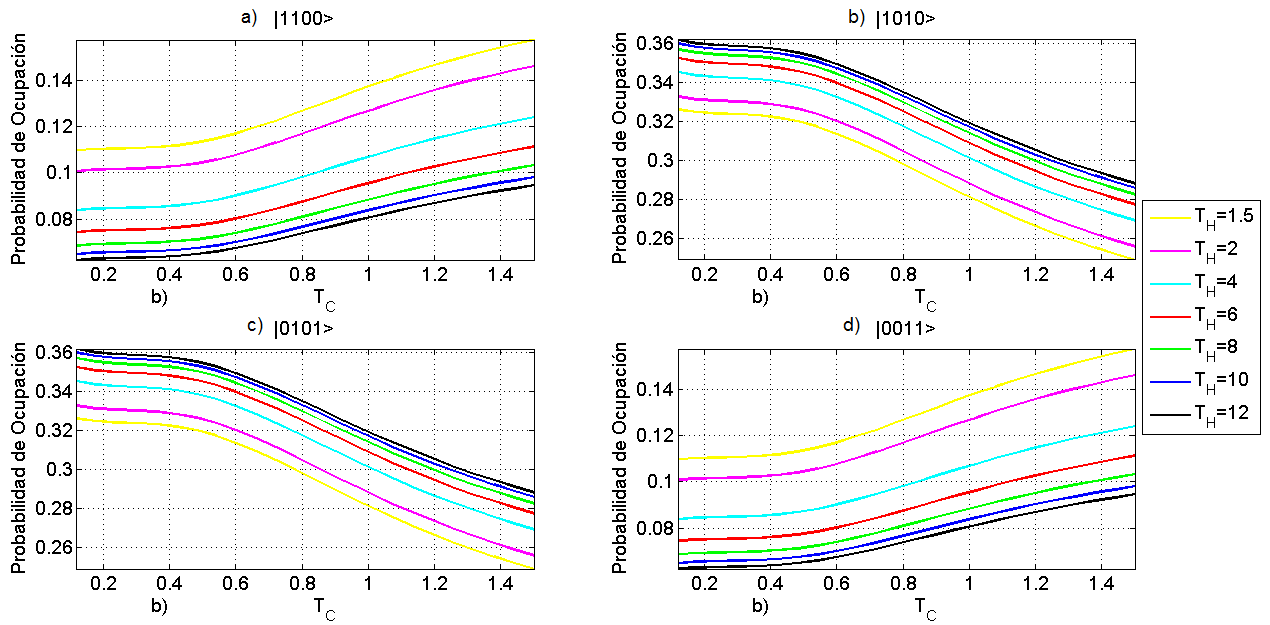


Figura 43 Probabilidad de ocupación para los cuatro estados de la matriz de densidad de dos estados $\rho^{(2)}$ paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H .

Ahora veamos el comportamiento de las poblaciones en función de la temperatura fría para ver sus proporciones.

En la figura 43 se presentan los cuatro estados de dos electrones en forma paramétrica con la temperatura fría. En la figura 43 a) estados ocupados QD1 y QD2 y d) estados ocupados QD3 y QD4, se tiene un comportamiento igual donde a mayor temperatura la probabilidad de ocupación es mayor, mientras que para las figuras de los estados de electrones en la diagonal b) estados ocupados QD1 y QD3 y c) estados ocupados QD2 y QD4, se presenta el comportamiento inverso, esto es a mayor valor de la temperatura fría se tiene menor ocupación de los estados en la misma proporción. Es importante señalar que los estados ocupados en los sitios $|1010\rangle$ y el estado $|0101\rangle$ si bien decrece la población su valor mínimo es mayor que las otras dos poblaciones $|1100\rangle$ y $|0011\rangle$ que están creciendo.

Después de observar el comportamiento de los estados, podemos decir que para los estados $|1100\rangle$ y $|1010\rangle$ se observa que el comportamiento creciente. Para los estados $|0101\rangle$ y $|0011\rangle$ se tiene un comportamiento decreciente, pero siempre dominantes en las regiones de temperatura estudiadas.

Ahora se presenta el comportamiento para las corrientes de sitio para los cuatro puntos cuánticos en función de las temperaturas fría y caliente, observamos que las corrientes en los sitios QD1 y QD2 tiene

los valores más grandes como en la misma región que la discordia. Después se realiza el análisis de estas corrientes de forma paramétrica con la temperatura fría y en función de la discordia

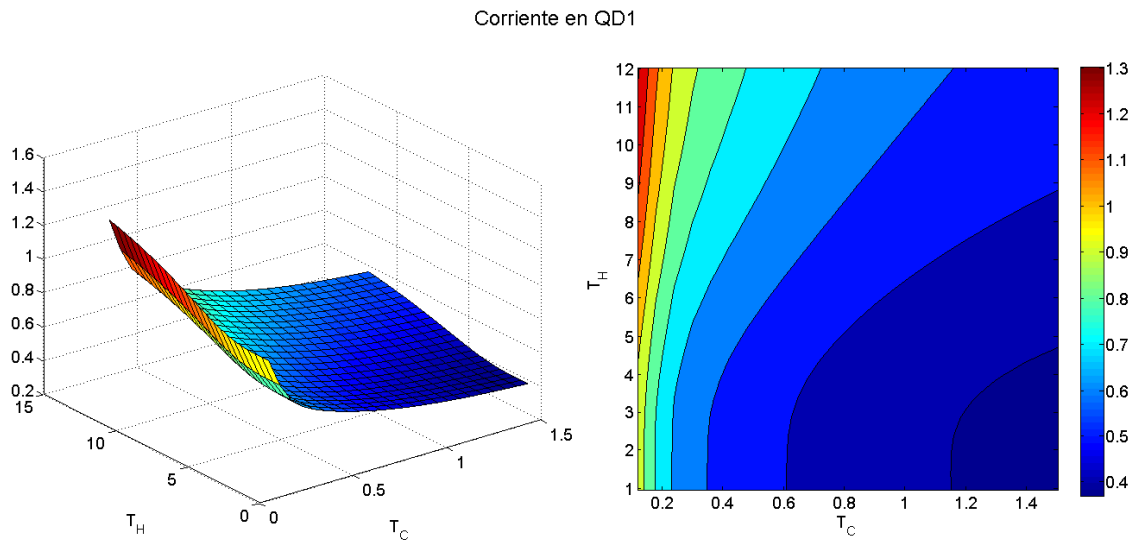


Figura 44 Corriente de calor para el sitio QD1 como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

En la figura 44 se presenta la corriente para el sitio 1 como función de T_C y T_H . La corriente de calor para el sitio uno toma su máximo valor cuando se tienen temperaturas T_H altas y temperatura fría bajas, además esta corriente tiene una tendencia a disminuir cuando nos movemos hacia temperaturas T_C mayores.

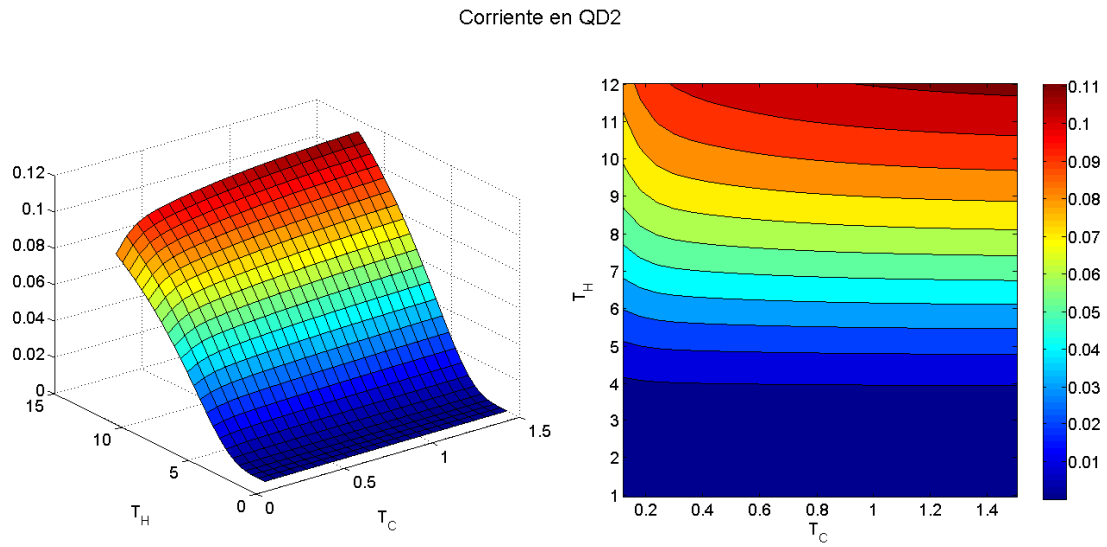


Figura 45 Corriente de calor para el sitio QD2 como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

Siguiendo el análisis se tiene la figura 45 en la cual se presenta la corriente del sitio 2 y observamos como a medida que la temperatura T_H comienza a decrecer la corriente decae de manera acelerada.

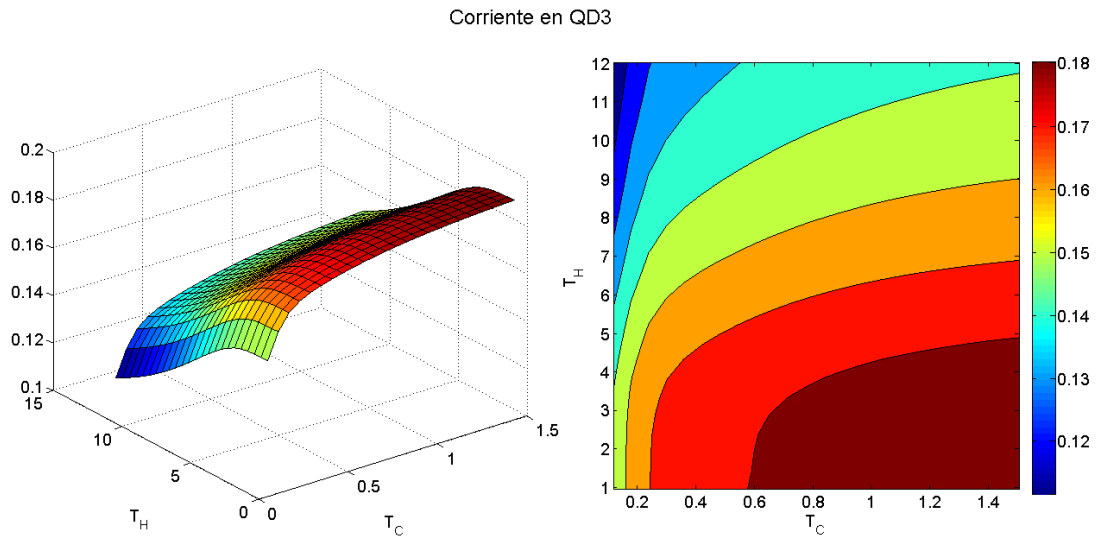


Figura 46 Corriente de calor para el sitio QD3 como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

Fijándonos a detalle en la figura 46 para la corriente de QD3, podemos inferir que tiene una tendencia a decaer entre cuando la temperatura caliente comienza a tener valores mayores. El máximo de esta corriente se observa cuando la temperatura fría es mayor, y T_H tiene valores pequeños

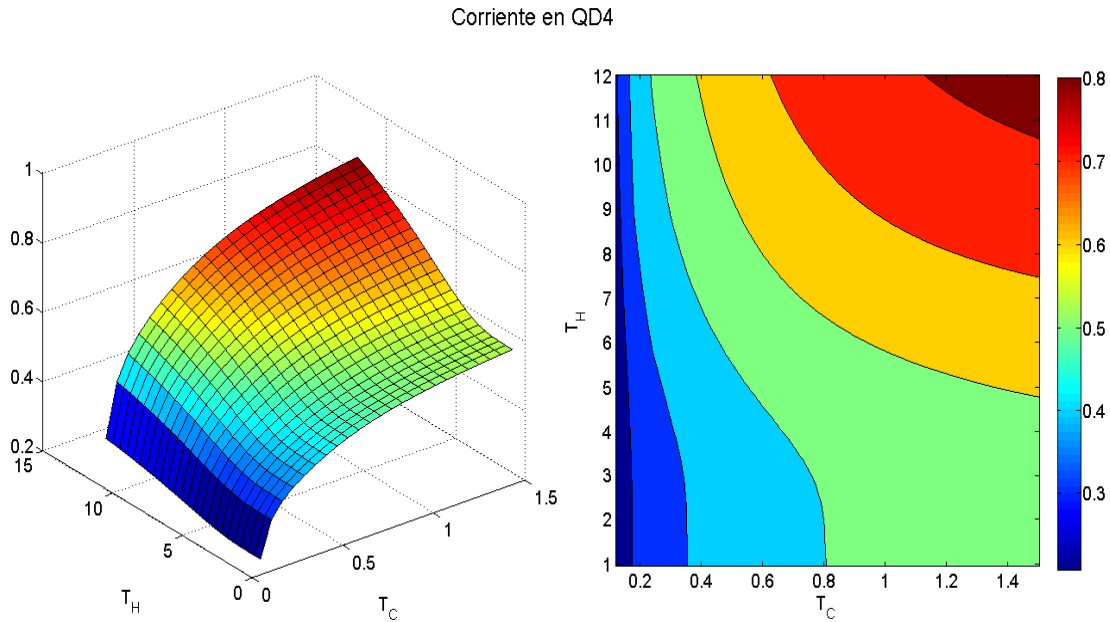


Figura 47 Corriente de calor para el sitio QD4 como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

En la figura 47 se muestra la corriente del último sitio QD4 en la cual tenemos un comportamiento con tendencia a crecer, cuando ambas temperaturas tienen que toman valores altos, de no ser así, el valor de la corriente será bajo.

Finalmente, se presenta en la siguiente el análisis de las cuatro corrientes de sitio en forma paramétrica con la temperatura T_C , donde se observa un comportamiento lineal, creciente y decreciente, se realiza solo con la temperatura fría ya que esta presenta también una forma lineal mientras que cuando se parametriza con la temperatura caliente no tenemos este comportamiento, que es el de interés.

Corriente de sitio	Parametrización con T_c	Gráfica de corriente vs discordia
J_{QD1}	Forma lineal creciente Pendientes iguales No dependen de T_H	
J_{QD2}	Lineal creciente $J_{QD2}(T_c)$ vs $D(T_c)$	
J_{QD3}	Lineal decreciente Pendientes iguales No dependen de T_H	
J_{QD4}	Lineal creciente	

Tabla 3 Corrientes de sitio en función de la discordia parametrizadas con la temperatura T_c

En la tabla 3 se presentan las gráficas de las corrientes de sitio como función de la discordia, parametrizadas con la temperatura fría. Las corrientes de sitio en función de la discordia presentan también una forma lineal creciente, excepto la corriente del sitio 3 que es decreciente, tienen el mismo comportamiento lineal, pero un valor en la pendiente diferente. Asimismo, vemos que no tocan el origen, es decir, discordia cero, corriente diferente de cero. En este caso puede tener corrientes provenientes de

los estados de ocupación de un electrón. Es decir, no toda la corriente proviene de los estados de dos electrones, que son los que originan la discordia.

Estos resultados implican que en si este modelo se tuviese de forma experimental, en energías de sitio iguales diferentes, se podría relacionar y hasta caracterizar a través de una propiedad térmica como el flujo de calor una propiedad de correlación como la discordia. Recordemos que esta correlación cuántica se asocia además de la separabilidad de los estados a una capacidad de procesar información, para nuestro caso el flujo del calor del arreglo de puntos cuánticos hacia los reservorios.

Por lo que, del análisis de los dos casos estudiados, podemos establecer el carácter lineal de las corrientes térmicas en función de la discordia cuando se parametriza con la temperatura fría. Este es un resultado importante de nuestro trabajo

7.2.5. Energía promedio

Finalmente, por completes, presentamos el comportamiento de la energía promedio como función de las temperaturas.

- Para energías de sitio diferentes

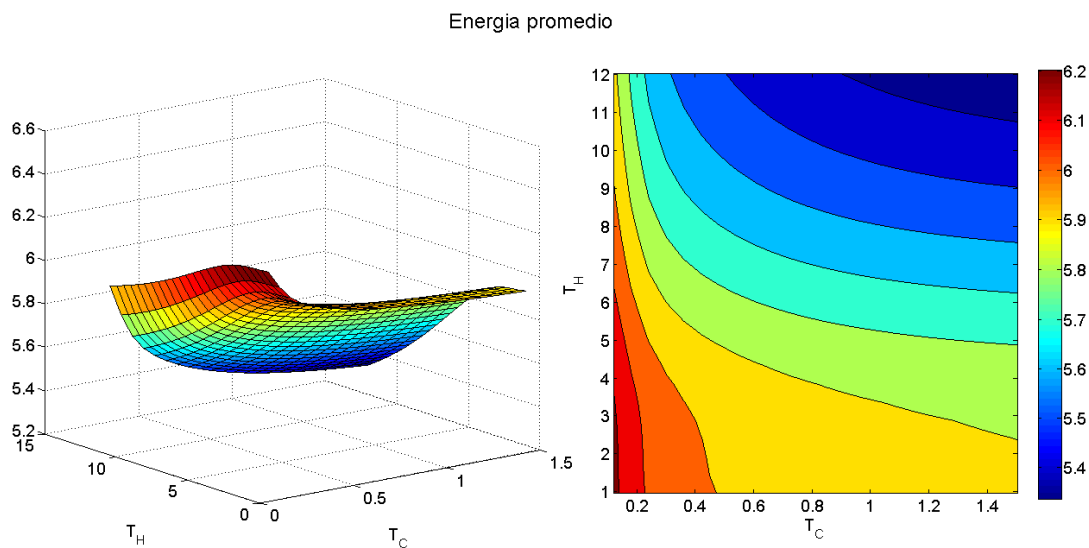


Figura 48 Energía promedio como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

Figura 48 para la energía promedio que a temperaturas grandes de T_C y T_H la energía promedio es mayor y va bajando su valor conforme estas temperaturas bajan.

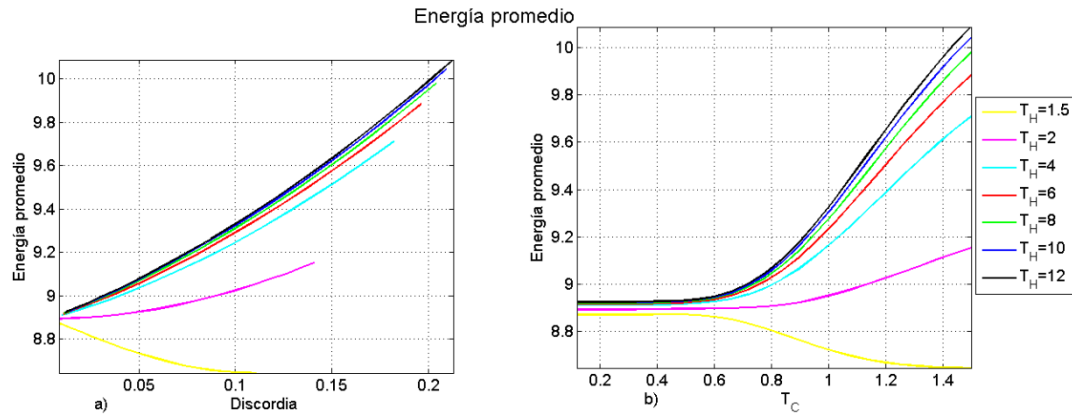


Figura 49. Energía promedio como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H

En la figura 49 observamos que el comportamiento de la energía promedio parametrizada con la temperatura fría. La energía tiene tendencia a aumentar con la discordia excepto para la temperatura $T_H = 1.5$ la cual tiende a decaer, se ve que a mayor discordia y a mayor temperatura T_H mayor es la energía, exceptuando para la temperatura T_H mencionada. Al igual se observa en la figura 49 b) que la energía promedio tiene tendencia a crecer con T_C excepto la temperatura caliente más baja.

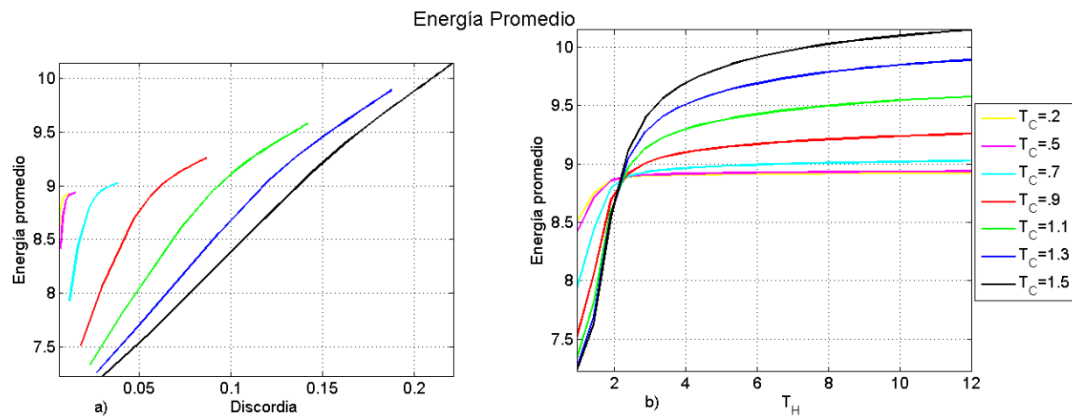


Figura 50 Energía promedio como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_H para diferentes valores de T_C .

Para la parametrización con la temperatura caliente los comportamientos son algo diferentes.

En la figura 50 a) observamos que el comportamiento de la energía con la discordia tiene una tendencia a ser mayor entre más grande sea la discordia y la T_C , para la gráfica 50 b) como función de T_H se observa un comportamiento con crecimiento hasta un valor de T_H de 3 y luego se mantiene constante la energía.

- **Energías de sitio iguales**

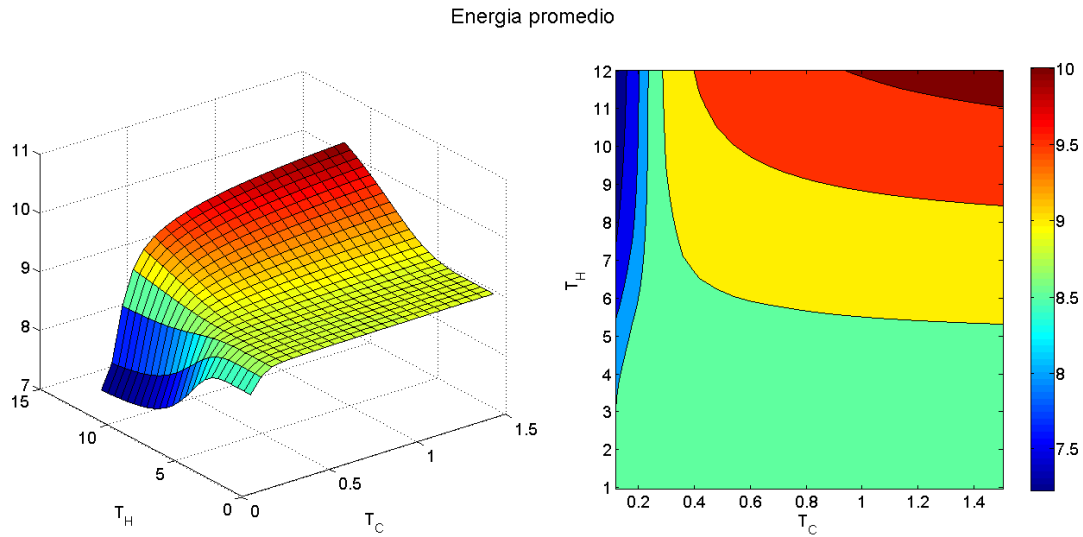


Figura 51 Energía promedio como función de las temperaturas T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

En la figura 51 se presentan como la energía promedio del sistema como función de las temperaturas caliente y fría. La energía tiene su valor máximo a temperaturas T_H y T_C mayores y es menor si la temperatura T_H es baja.

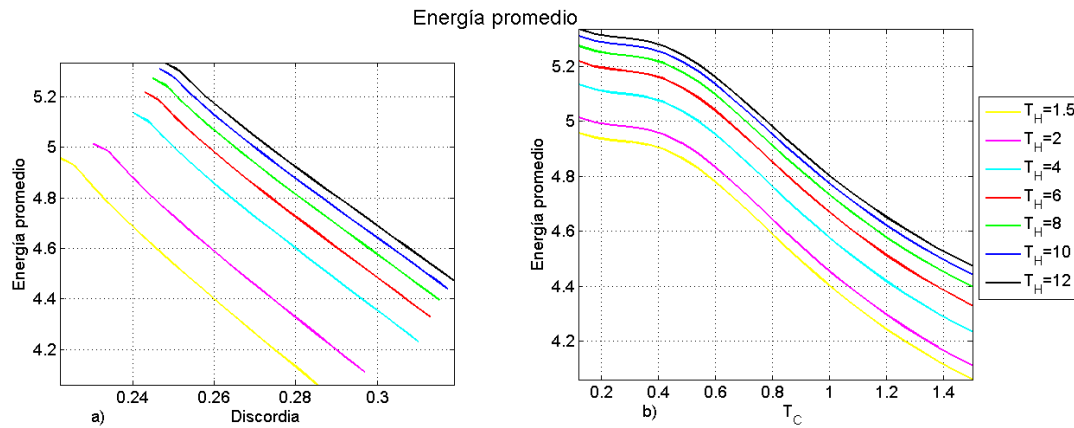


Figura 52 Energía promedio como función de la a) discordia y b) paramétrica con T_C para diferentes valores de T_H .

La energía promedio parametrizada con T_C , presenta un comportamiento con la discordia

La figura 52 muestra dicho comportamiento en el cual la energía promedio es decreciente de manera lineal con la discordia y es uno a uno. Las pendientes de estas gráficas son casi las mismas para la temperatura caliente, en la figura 52 b) se observa también un decaimiento en la energía conforme se aumenta la temperatura fría. Por lo que el aumento de la discordia se asocia con la disminución de las energías térmicas, en esta parametrización.

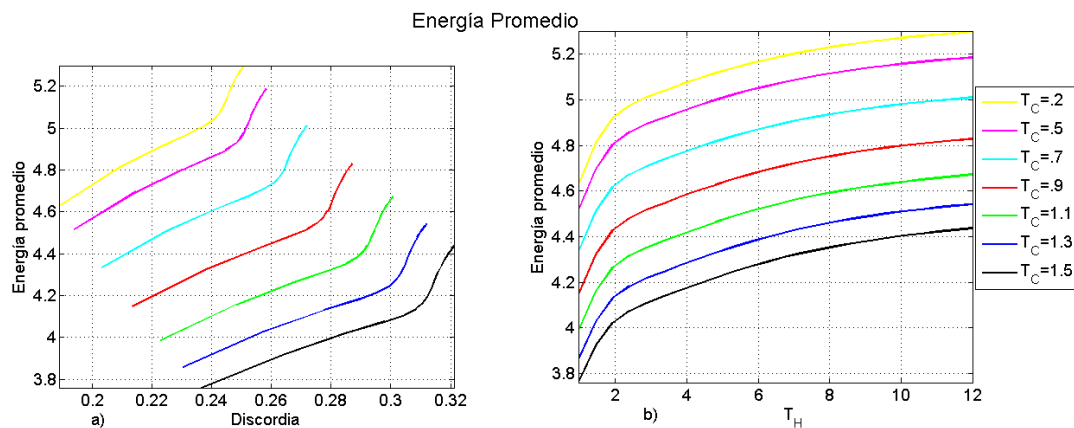


Figura 53 Energía promedio como función de la discordia a) y paramétrica con T_H b) para diferentes valores de T_C

Haciendo un análisis similar de la energía promedio, parametrizada con T_H , se presentan en la figura 53 a) vemos que el crecimiento es lineal con la discordia, pero hay un punto donde el crecimiento se vuelve más rápido, en cambio para la temperatura fría, en la figura b) el aumento es más relajado y menos observable.

Por lo que podemos establecer que la energía térmica promedio (cuando se parametriza contra T_C , la temperatura fría) es un buen indicador, uno a uno para determinar la discordia, y parece que la pendiente de esta relación no es muy sensible a la temperatura caliente.

Capítulo 8. Conclusiones y trabajo futuro

En este trabajo se utilizó el enfoque de sistemas cuánticos abiertos para estudiar las propiedades en estado estacionario de una máquina térmica construida con un arreglo de cuatro puntos cuánticos con hasta dos electrones a tres temperaturas distintas T_C , T_H y T_R .

Se presentó la deducción de la ecuación maestra de la matriz de densidad reducida, para el modelo de cuatro puntos cuánticos acoplado a cuatro reservorios fermiónicos térmicos con cero, uno y dos electrones

Se describieron los eigenestados y las eigenfunciones para el sistema cerrado. Mostrando que para el sistema cuántico cerrado es posible tener estados entrelazados en el caso de dos electrones. Estos estados y funciones son la base para el cálculo de las probabilidades de transición de entrada de un electrón y la transición de estados de un electrón a dos electrones.

Se realizó el cálculo de las poblaciones del sistema cuántico con cero, una y dos electrones, los cálculos del flujo de calor por sitio y la discordia como función de las temperaturas T_C y T_H . A partir de estos cálculos de flujo de calor se observó que en el caso de QD1, QD2 y QD3 tenemos que a mayor temperatura T_H se tendrá un mayor valor de la corriente, para el punto cuántico cuatro se tiene que cuando las energías de sitio son diferentes tenemos un máximo cuando la temperatura T_C es de 0.2. Así mismo se realizaron figuras en dos dimensiones variando una de las temperaturas (T_C primero y luego T_H) y se parametrizaron las propiedades de las poblaciones, la corriente de calor, energía promedio versus la discordia.

A partir del análisis de los resultados las poblaciones si son dependientes de la discordia cuántica a medida la población se vea disminuida por la discordia, tenemos otra que se ve afectada de manera inversa. Se observó que los estados con probabilidades apreciables en los rangos de temperaturas estudiadas son los $|a_1^2\rangle$, que es el estado donde tenemos ocupación en sitio QD1 y QD2, $|a_2^2\rangle$ donde la ocupación se encuentra en los sitios QD1 y QD3 y por ultimo $|a_3^2\rangle$ el cual implica ocupación en QD2 y QD4, dos de ellos a lo largo de la diagonal. -

Los resultados de las correlaciones cuánticas mostraron que la concurrencia (separabilidad de estados) es una propiedad marginal para este sistema cuántico y la discordia es la correlación cuántica dominante en el proceso del flujo de calor, y de probabilidad de ocupación de los estados cuánticos. A partir de estos

resultados concluimos que las corrientes en función de la discordia (parametrizada por la temperatura fría T_C), cumplen con la siguiente relación

$$\langle J_{Q,i} \rangle = \alpha(T_H) D \quad (68)$$

Esta ecuación implica que la corriente es función lineal de la discordia y la pendiente α depende solo de la temperatura T_H , el valor de α es positivo las corrientes en los sitios QD1, QD2 y QD4 y es negativa para el punto cuántico tres (cuando $\varepsilon_i = 0$) y positivas para todos los puntos cuánticos cuando las energías del hamiltoniano del sistema son distintas de cero.

Podemos entonces establecer que la discordia cuántica, que puede usarse como recurso para procesamiento de información puede ser creada y aumentada en una máquina térmica como la que estudiamos. Además, existen condiciones de las temperaturas caliente y fría para máximos relativos en la producción de discordia.

Si este modelo se hiciera experimentalmente se podría relacionar y hasta caracterizar la discordia cuántica en esta máquina a través de la medición de una propiedad térmica (observable) como el flujo de calor o energía promedio

Para trabajo futuro, podemos ver las dinámicas fuera de equilibrio de este sistema para ver las evoluciones temporales de las propiedades y ver las relaciones entre ellas parametrizadas por el tiempo.

Literatura citada

- Alicki, R. Quantum open systems as a model of a heat engine. *J. Phys A: Math. Gen.* 1979, 12, L103–L107.
- Carnot, S, *Reflections on the motive power of fire, and on motive power of fire, and on machines fitted to develop that power*, Paris, France, 1824.
- Davide Venturelli, Rosario Fazio, and Vittorio Giovannetti Minimal Self-Contained Quantum Refrigeration Machine Based on Four Quantum Dots *Phys. Rev. Lett.* 110, 256801
- Einstein, A. Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen "Gesichtspunkt" (On a Heuristic Viewpoint Concerning the Production and Transformation of Light). *Annalen der Physik* 1905, 17, 132
- Gemmer J., Michel M., Mahler G., *Quantum Thermodynamics*, Springer, 2009
- Geusic, J.; du Bois, E.O.S.; Grasse, R.D.; Scovil, H.E. Quantum equivalence of the carnot cycle. *Phys. Rev.* 1967, 156, 343–351
- Gorini, V.; Kossakowski, A.; Sudarshan, E.C.G. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems. *J. Math. Phys.* 1976, 17, 821–825.
- Henderson, L., Vedral, V. Classical, quantum and total correlations. *J. Phys. A: Math. Gen.* 34, 6899 (2001)
- Kosloff, R. A quantum mechanical open system as a model of a heat engine. *J. Chem. Phys.* 1984, 80, 1625–1631.
- Lindblad, G. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Comm. Math. Phys.* 1976, 48, 119–130.
- Linden, N.; Popescu, S.; Skrzypczyk, P. How small can thermal machines be? Towards the smallest possible refrigerator. *Phys. Rev. Lett.* 2010, 105, 130401.
- Ollivier, H., Zurek, W. H.: Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. *Phys. Rev. Lett.* 88, 017901 (2001)
- Reinhold Bertlmann, A. A. (2008). *Decoherence and open quantum systems*. Thesis Wien Universität.
- Scovil, H.E.; du Bois, E.O.S. Three-level masers as heat engines. *Phys. Rev. Lett.* 1959, 2, 262–263.
- Streltsov A., *Quantum Correlations Beyond Entanglement and their role in quantum information theory*, Springer, 2009.
- Udo Seifert, *Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines*, *Rep. Prog. Phys.* 75 126001, 2012
- Wootters William K., Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits, *Phys. Rev. Lett.*, 1998. 80.2245
- Zurek, W.H.: Einselection and decoherence from an information theory perspective. *Ann. Phys. (Leipzig)* 9, 855–864 (2000)

Apéndice A. Descripción de la matriz de densidad en un sistema abierto

Dinámica de sistemas abiertos

En términos generales, un sistema abierto es un sistema cuántico S que está acoplado a otro sistema cuántico B llamado el medio ambiente. Por lo tanto, representa un subsistema del sistema $S + B$ total combinado, con lo que en la mayoría de los casos se supone que el sistema combinado se cierra, siguiendo la dinámica Hamiltoniana. El estado del subsistema S , sin embargo, va a cambiar como consecuencia de su dinámica interna y de la interacción con el ambiente. La interacción da lugar a ciertas correlaciones de entorno con el sistema de tal manera que los resultantes cambios de estado de S ya no pueden, en general, ser representados en términos de dinámica Hamiltoniana. Como se muestra en la figura 1 del capítulo dos

Aquí tenemos que el Hamiltoniano es

$$\hat{H} = \hat{H}(S) + \hat{H}(B) + \hat{H}(S, B) = \hat{H}_{S+B} + \hat{H}(S, B), \quad (A1)$$

donde $\hat{H}(S)$ es el Hamiltoniano del sistema y $\hat{H}(B)$ es el Hamiltoniano del baño. El Hamiltoniano de interacción $\hat{H}(S, B)$ tiene la forma,

$$\hat{H}(S, B) = \sum_i \hat{L}_i(S) \otimes \hat{F}_i(B) = \sum_i \hat{L}_i(S) \hat{F}_i(B) = \sum_i \hat{L}_i \hat{F}_i = \hat{V} \quad (A2)$$

Donde estos operadores $\hat{L}_i$ y $\hat{F}_i$ son los operadores de interacción: $\hat{L}_i$ está definido en el sistema y el $\hat{F}_i$ es el operador de interacción del baño, estos dos operadores son los que van a decir el acoplamiento del sistema y el baño.

Para hacer el análisis de este sistema es conveniente cambiarse a la representación de interacciones. Esta representación se define por la transformación unitaria

$$\hat{\rho}^{(i)}(t) = \hat{U}_{S+B} \hat{\rho}(t) \hat{U}_{S+B}^\dagger. \quad (\text{A3})$$

Donde este operador unitario es el siguiente

$$\hat{U}_{S+B} = \exp(i\hat{H}_{S+B} t/\hbar) \quad (\text{A4})$$

se puede observar que en esta transformación el Hamiltoniano de interacción con lo que el álgebra se vuelve más sencilla.

Tomando en cuenta la ecuación de evolución temporal,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \quad (\text{A5})$$

Realizamos la transformación al cuadro de interacción, utilizando la ecuación A3, por lo tanto, la ecuación de evolución temporal se transforma,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}^{(i)}(t)}{\partial t} = [\hat{V}^{(i)}(t), \hat{\rho}^{(i)}(t)]. \quad (\text{A6})$$

Para poder expresar el modelo de cuatro puntos cuánticos en esta dinámica (sistemas cuánticos abiertos), se tiene que realizar un par de consideraciones para lograr resolver esta ecuación, primero se debe tomar en cuenta la aproximación Markoviana, la cual implica que no hay correlaciones a ningún tiempo, se expresa como la siguiente condición de separabilidad

$$\hat{\rho}^{(i)}(t) = \hat{R}_S^{(i)}(t) \otimes \hat{R}_B^{(i)}(t), \quad (\text{A7})$$

También consideramos que el baño se encuentra en estado estacionario,

$$\hat{R}_B^{(i)}(t) = \hat{\rho}_B(0). \quad (\text{A8})$$

Y en equilibrio termodinámico,

$$\hat{\rho}_B(0) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\hat{H}_B}{\kappa_B T}\right), \quad (\text{A9})$$

con

$$Z = \text{Tr}\left\{\exp\left(-\frac{\hat{H}_B}{\kappa_B T}\right)\right\}. \quad (\text{A10})$$

Teniendo en cuenta estas consideraciones y haciendo un poco de álgebra, la ecuación de evolución temporal (19) toma la siguiente forma,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{R}_s^{(i)}(t)}{\partial t} = & -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} \int_0^t d\tau \left\{ \left[\hat{L}_i^{(i)}(t), \hat{L}_j^{(i)}(t-\tau) \hat{R}_s^{(i)}(t-\tau) \right] G_{ij}(\tau) \right. \\ & \left. - \left[\hat{L}_i^{(i)}(t), \hat{R}_s^{(i)}(t-\tau) \hat{L}_j^{(i)}(t-\tau) \right] G_{ji}(-\tau) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

en donde podemos identificar las funciones de correlación del baño,

$$G_{ij}(\tau) = \text{Tr}_B \left\{ F_i^{(i)}(\tau) F_j(0) \rho_B(0) \right\}, \quad (\text{A12})$$

$$G_{ij}(-\tau) = \text{Tr}_B \left\{ F_j(0) F_i^{(i)}(\tau) \rho_B(0) \right\}. \quad (\text{A13})$$

Para la solución de esta ecuación se requiere ver como son las evoluciones de elementos matriciales en la eigenbase del sistema,

$$\dot{R}_{s's}^{(i)}(t) = \left\langle s' \left| \frac{\partial \hat{R}_s^{(i)}(t)}{\partial t} \right| s \right\rangle, \quad (\text{A14})$$

Haciendo la proyección de los estados s y s' podemos introducir los siguientes parámetros,

$$\Gamma_{mkl n}^+ = 1/\hbar^2 \sum_{ij} m_{s'mns}^{(i,j)} \int_0^t d\tau e^{-i\omega_{ns}\tau} G_{ij}(\tau), \quad (\text{A15})$$

$$\Gamma_{mkl n}^- = 1/\hbar^2 \sum_{ij} m_{lnmk}^{(i,j)} \int_0^t d\tau e^{-i\omega_{mk}\tau} G_{ij}(-\tau), \quad (\text{A16})$$

y las funciones $m_{kl o p}^{(i,j)}$ se definen como sigue

$$m_{kl o p}^{(i,j)} = \sum \langle k | L_i | l \rangle \langle o | L_j | p \rangle, \quad (\text{A17})$$

Estos coeficientes $m_{kl o p}^{(i,j)}$ significan las probabilidades de transición de un estado k a un estado p , en el sistema.

La ecuación de evolución en su forma matricial (teniendo cuenta las ecuaciones anteriores), es la siguiente

$$\dot{R}_{s's}^{(i)}(t) = \sum_{m,n} R_{s'smn}(t) R_{mn}^{(i)}(t), \quad (\text{A18})$$

los elementos $R_{s'smn}(t)$ son

$$R_{s'smn}(t) = \left[- \sum_k \delta_{sn} \Gamma_{s'kk m}^+ + \Gamma_{nss'm}^+ + \Gamma_{nss'm}^- - \sum_k \delta_{s'm} \Gamma_{nkk s}^- \right] \exp(it(\omega_{s's} - \omega_{mn})). \quad (\text{A19})$$

Con los parámetros $\Gamma_{m k l n}^+$ y $\Gamma_{m k l n}^-$ podemos introducir los términos de la transición de probabilidad,

$$W_{s m} = 2\text{Re}\{\Gamma_{m s s m}^+\}. \quad (\text{A20})$$

además de los términos adiabáticos y no adiabáticos (respectivamente),

$$\tilde{\gamma}_{s's} = -(\Gamma_{s s s' s'}^+ + \Gamma_{s s s' s'}^-), \quad (\text{A21})$$

$$\gamma_{s's} = \sum_k (\Gamma_{s' k k s'}^+ + \Gamma_{s k k s}^-). \quad (\text{A22})$$

Y los parámetros de amortiguamiento adiabáticos,

$$W_{s s'}^{ad} = \text{Re}\{-(\Gamma_{s s s' s'}^+ + \Gamma_{s s s' s'}^-)\} = \text{Re}\{\tilde{\gamma}_{s's}\} \quad (\text{A23})$$

Los parámetros adiabáticos se pueden dividir en parte real y parte imaginaria,

$$\text{Re}\{\gamma_{s's}\} = \frac{1}{2} \left(\sum_k (W_{k s'} + W_{k s}) \right), \quad (\text{A24})$$

$$\text{Im}\{\gamma_{s's}\} = \text{Im}\left\{\sum_k (\Gamma_{s' k k s'}^+)\right\} - \text{Im}\left\{\sum_k (\Gamma_{s k k s}^-)\right\}, \quad (\text{A25})$$

Y a partir de estos podemos definir a su vez,

$$\Delta\omega_{s's} = \text{Im}\{\gamma_{s's}\} + \text{Im}\{\tilde{\gamma}_{s's}\}, \quad (\text{A26})$$

a este término se le denomina como un cambio de frecuencia,

$$\gamma^{(s's)} = \frac{1}{2} \left(\sum_k W_{k s'} + \sum_k W_{k s} \right) + W_{s s'}^{ad} \quad (A27)$$

Estos dos últimos son los términos responsables de la pérdida de coherencia (decaimiento de los términos fuera de la diagonal de la matriz de densidad reducida) en el sistema debido al baño.

Y la ecuación de evolución temporal introduciendo estos parámetros es de la siguiente manera

$$\dot{R}_{s's}^{(i)}(t) = \begin{cases} \sum_m W_{sm} R_{mm}^{(i)}(t) - R_{ss}^{(i)}(t) \sum_m W_{ms} & (s' = s) \\ -(\gamma^{(s's)} + i\Delta\omega_{s's}) R_{s's}^{(i)}(t) & (s' \neq s) \end{cases}. \quad (A28)$$

Equivale a tomar $R_{s's m n}$ de la siguiente manera

$$R_{s's m n} = \begin{cases} \delta_{mn}(1 - \delta_{ms})W_{sm} - \delta_{ms}\delta_{ns} \sum_k W_{ks} & (s' = s) \\ -(\gamma^{(s's)} + i\Delta\omega_{s's})\delta_{ms'}\delta_{ns} & (s' \neq s) \end{cases}, \quad (A29)$$

Y por último si nos regresamos al esquema de Schrödinger la ecuación maestra nos queda,

$$\dot{R}_{s's}(t) + D_{s's}(t) = \sum_{m,n} R_{s's m n} R_{m n}(t), \quad (A30)$$

con

$$R_{s's}(t) = \langle s' | R_S(t) | s \rangle, \quad D_{s's}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle s' | [H_S, R_S(t)] | s \rangle. \quad (A31)$$

Y por último al parámetro $D_{s's}(t)$ se le llama término de coherencia y es de la forma

$$D_{s's}(t) = \frac{i}{\hbar} \sum_{m,n} D_{s's m n} R_{m n}(t), \quad (\text{A32})$$

$$D_{s's m n}(t) = (E_{s'}^S - E_S^S) \delta_{ms'} \delta_{ns} + \langle s' | V_{ext} | s \rangle \delta_{ns} - \langle s' | V_{ext} | s \rangle \delta_{ms'}, \quad (\text{A33})$$

En este término se incluye un campo externo de la forma $\hat{H}(S) = \hat{H}_O + \hat{V}_{ext}$

Apéndice B. Transiciones W_{sr}

En este anexo se muestran como son todas las transiciones de la forma

$$W_{m\ n} = \frac{2}{\hbar^2} \sum_{i,j} m_{j\ k\ m\ n}^{(i,j)} * n(E_i^{tot}, \beta_j) = \frac{2}{\hbar^2} \sum_{i,j} |\langle r_l | c_i^\dagger | s_k \rangle|^2 * n(E_i^{(2)} - E_j^{(1)}, \beta_j). \quad (B1)$$

Explícitamente para $W_{s_i r_1}$

$$\begin{aligned} W_{s_1 r_1} &= \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(V_{11}^* \cos \frac{\theta_1}{2} + V_{13}^* \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 * n(E_1^{(2)} - E_1^{(1)}, \beta_2) + \left(\left(V_{12}^* \cos \frac{\theta_1}{2} + V_{14}^* \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. * n(E_1^{(2)} - E_1^{(1)}, \beta_3) \right] \\ W_{s_2 r_1} &= \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(-V_{11}^* \sin \frac{\theta_1}{2} + V_{13}^* \cos \frac{\theta_1}{2} \right)^2 * n(E_1^{(2)} - E_2^{(1)}, \beta_2) + \left(\left(-V_{12}^* \sin \frac{\theta_1}{2} + V_{14}^* \cos \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. * n(E_1^{(2)} - E_2^{(1)}, \beta_3) \right] \\ W_{s_3 r_1} &= \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(V_{11}^* \cos \frac{\theta_2}{2} + V_{12}^* \sin \frac{\theta_2}{2} \right)^2 * n(E_1^{(2)} - E_3^{(1)}, \beta_1) + \left(\left(V_{12}^* \cos \frac{\theta_2}{2} + V_{13}^* \sin \frac{\theta_2}{2} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. * n(E_1^{(2)} - E_3^{(1)}, \beta_4) \right] \\ W_{s_4 r_1} &= \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(-V_{11}^* \sin \frac{\theta_2}{2} + V_{12}^* \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^2 * n(E_1^{(2)} - E_4^{(1)}, \beta_1) + \left(\left(-V_{13}^* \sin \frac{\theta_2}{2} + V_{14}^* \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. * n(E_1^{(2)} - E_4^{(1)}, \beta_4) \right] \end{aligned} \quad (B2)$$

Para $W_{s_i r_2}$

$$\begin{aligned} W_{s_1 r_2} &= \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(V_{21}^* \cos \frac{\theta_1}{2} + V_{23}^* \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 * n(E_2^{(2)} - E_1^{(1)}, \beta_2) + \left(\left(V_{22}^* \cos \frac{\theta_1}{2} + V_{24}^* \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. * n(E_2^{(2)} - E_1^{(1)}, \beta_3) \right] \end{aligned} \quad (B3)$$

$$W_{s_2 r_2} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(-V_{21}^* \sin \frac{\theta_1}{2} + V_{23}^* \cos \frac{\theta_1}{2} \right)^2 * n(E_2^{(2)} - E_2^{(1)}, \beta_2) + \left(\left(-V_{22}^* \sin \frac{\theta_1}{2} + V_{24}^* \cos \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_2^{(2)} - E_2^{(1)}, \beta_3) \right].$$

$$W_{s_3 r_2} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(V_{21}^* \cos \frac{\theta_2}{2} + V_{22}^* \sin \frac{\theta_2}{2} \right)^2 * n(E_2^{(2)} - E_3^{(1)}, \beta_1) + \left(\left(V_{24}^* \cos \frac{\theta_2}{2} + V_{24}^* \sin \frac{\theta_2}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_2^{(2)} - E_3^{(1)}, \beta_4) \right]$$

$$W_{s_4 r_2} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(-V_{21}^* \sin \frac{\theta_2}{2} + V_{22}^* \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^2 * n(E_2^{(2)} - E_4^{(1)}, \beta_1) + \left(\left(-V_{23}^* \sin \frac{\theta_2}{2} + V_{24}^* \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_2^{(2)} - E_4^{(1)}, \beta_4) \right].$$

Tenemos también para $W_{s_i r_3}$

$$W_{s_1 r_3} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(V_{31}^* \cos \frac{\theta_1}{2} + V_{33}^* \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 * n(E_3^{(2)} - E_1^{(1)}, \beta_2) + \left(\left(V_{32}^* \cos \frac{\theta_1}{2} + V_{34}^* \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_3^{(2)} - E_1^{(1)}, \beta_3) \right]$$

(B4)

$$W_{s_2 r_3} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(-V_{31}^* \sin \frac{\theta_1}{2} + V_{33}^* \cos \frac{\theta_1}{2} \right)^2 * n(E_3^{(2)} - E_2^{(1)}, \beta_2) + \left(\left(-V_{32}^* \sin \frac{\theta_1}{2} + V_{34}^* \cos \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_3^{(2)} - E_2^{(1)}, \beta_3) \right].$$

$$W_{s_3 r_3} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(V_{31}^* \cos \frac{\theta_2}{2} + V_{32}^* \sin \frac{\theta_2}{2} \right)^2 * n(E_3^{(2)} - E_3^{(1)}, \beta_1) + \left(\left(V_{34}^* \cos \frac{\theta_2}{2} + V_{34}^* \sin \frac{\theta_2}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_3^{(2)} - E_3^{(1)}, \beta_4) \right]$$

$$W_{s_4 r_3} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(-V_{31}^* \sin \frac{\theta_2}{2} + V_{32}^* \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^2 * n(E_3^{(2)} - E_4^{(1)}, \beta_1) + \left(\left(-V_{33}^* \sin \frac{\theta_2}{2} + V_{34}^* \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_3^{(2)} - E_4^{(1)}, \beta_4) \right].$$

Y por último para $W_{s_i r_4}$

$$W_{s_1 r_4} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(V_{41}^* \cos \frac{\theta_1}{2} + V_{43}^* \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 * n(E_4^{(2)} - E_1^{(1)}, \beta_2) + \left(\left(V_{42}^* \cos \frac{\theta_1}{2} + V_{44}^* \sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_4^{(2)} - E_1^{(1)}, \beta_3) \right]$$

$$W_{s_2 r_4} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(-V_{41}^* \sin \frac{\theta_1}{2} + V_{43}^* \cos \frac{\theta_1}{2} \right)^2 * n(E_4^{(2)} - E_2^{(1)}, \beta_2) + \left(\left(-V_{42}^* \sin \frac{\theta_1}{2} + V_{44}^* \cos \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_4^{(2)} - E_2^{(1)}, \beta_3) \right].$$

$$W_{s_3 r_4} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(V_{41}^* \cos \frac{\theta_2}{2} + V_{42}^* \sin \frac{\theta_2}{2} \right)^2 * n(E_4^{(2)} - E_3^{(1)}, \beta_1) + \left(\left(V_{44}^* \cos \frac{\theta_2}{2} + V_{44}^* \sin \frac{\theta_2}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_4^{(2)} - E_3^{(1)}, \beta_4) \right] \quad (B5)$$

$$W_{s_4 r_4} = \frac{2}{\hbar^2} \left[\left(-V_{41}^* \sin \frac{\theta_2}{2} + V_{42}^* \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^2 * n(E_4^{(2)} - E_4^{(1)}, \beta_1) + \left(\left(-V_{43}^* \sin \frac{\theta_2}{2} + V_{44}^* \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^2 \right) \right. \\ \left. * n(E_4^{(2)} - E_4^{(1)}, \beta_4) \right].$$

Apéndice C. Probabilidades de ocupación de un electrón

En este anexo se muestran como son las probabilidades de ocupación para los estados de la matriz de densidad de un electrón primero para el caso con energías $\epsilon_1 = 2.1$, $\epsilon_3 = 2.9$, $\epsilon_4 = 4$ y $\epsilon_2 = \epsilon_1 + \epsilon_3 - \epsilon_4$ y con $\mu = .9798$, se puede apreciar cómo la ocupación de cada uno de los estados dependen de la temperatura. Se observa la diferencia de ocupaciones y como hay variaciones significativas dependiendo de la combinación de las temperaturas.

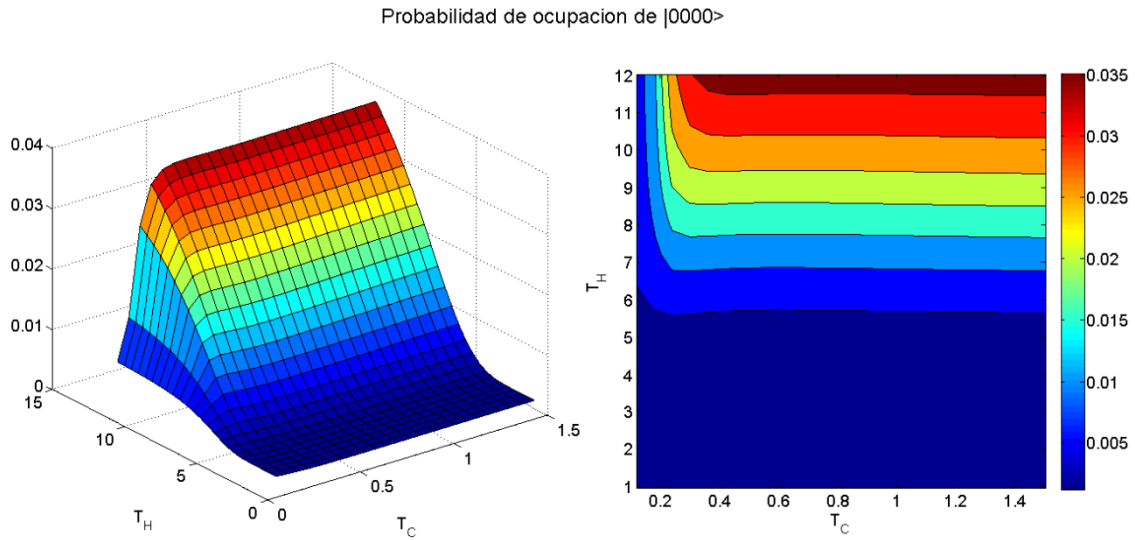


Figura 54 Probabilidad de ocupación de no tener electrones como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

La figura 54 muestra la probabilidad de ocupación del estado vacío, es decir, cuando no se tienen electrones dentro del sistema, es importante señalar que si observamos el eje de probabilidad es muy bajo, lo que implica que siempre tendremos por lo menos un electrón dentro del sistema debido al potencial químico seleccionado.

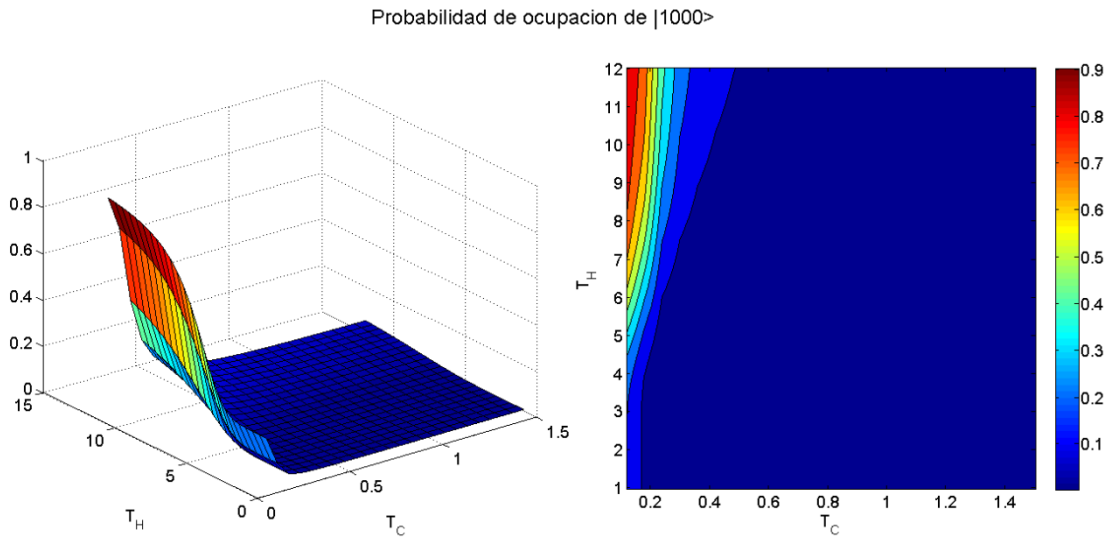


Figura 55 Probabilidad de ocupación QD1 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(1)}$.

En la figura 55 se presenta la ocupación en el QD1, este estado tiene probabilidad de ocupación cuando la temperatura fría es muy baja y la temperatura T_H es máxima, y sin esta combinación de condiciones el estado no tiene probabilidad de ocupación.

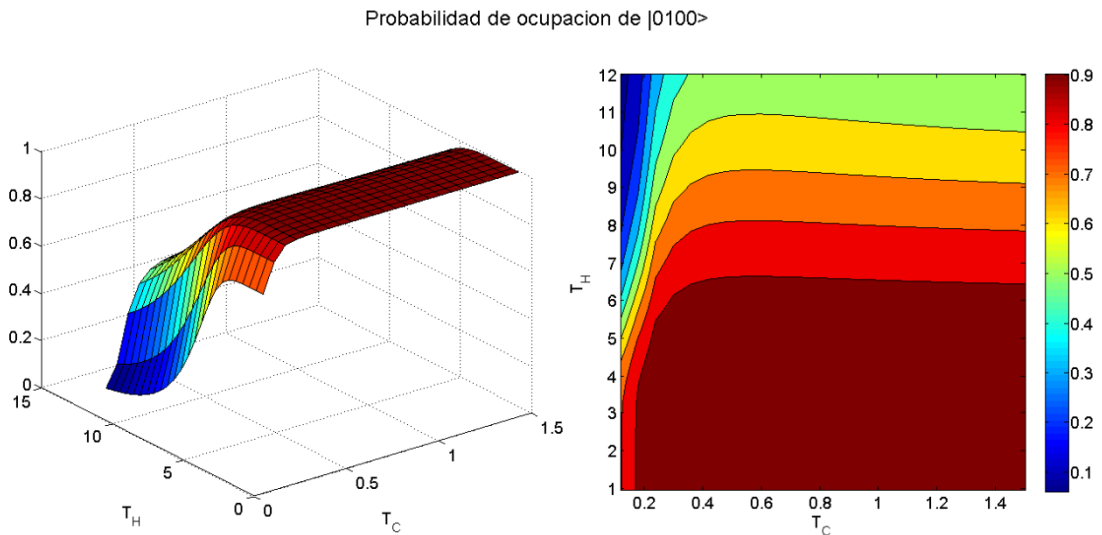


Figura 56 Probabilidad de ocupación QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el segundo estado de $\rho^{(1)}$.

En la figura 56 se observa como es la ocupación del estado dos su probabilidad de ocupación muy alta cuando la temperatura caliente es baja, además se puede observar que hay una temperatura donde la probabilidad se mantiene constante después de aumentar rápidamente.

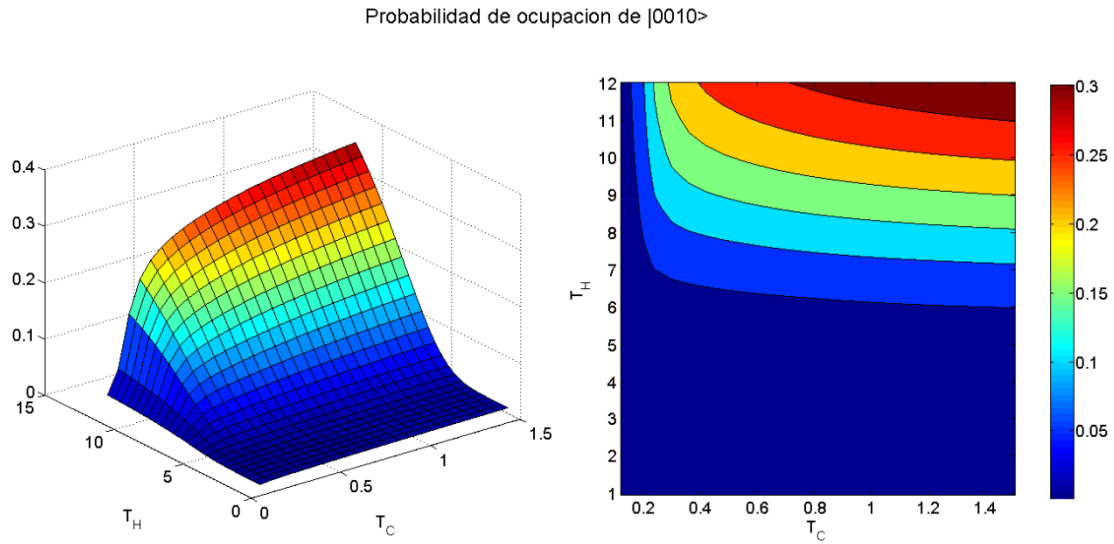


Figura 57 Probabilidad de ocupación QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el tercer estado de $\rho^{(1)}$

En la figura 57 para la ocupación del sitio QD3 tiene un comportamiento inverso, aumenta con la temperatura T_H donde el estado empieza a existir y se mantiene de manera casi constante para la temperatura fría.

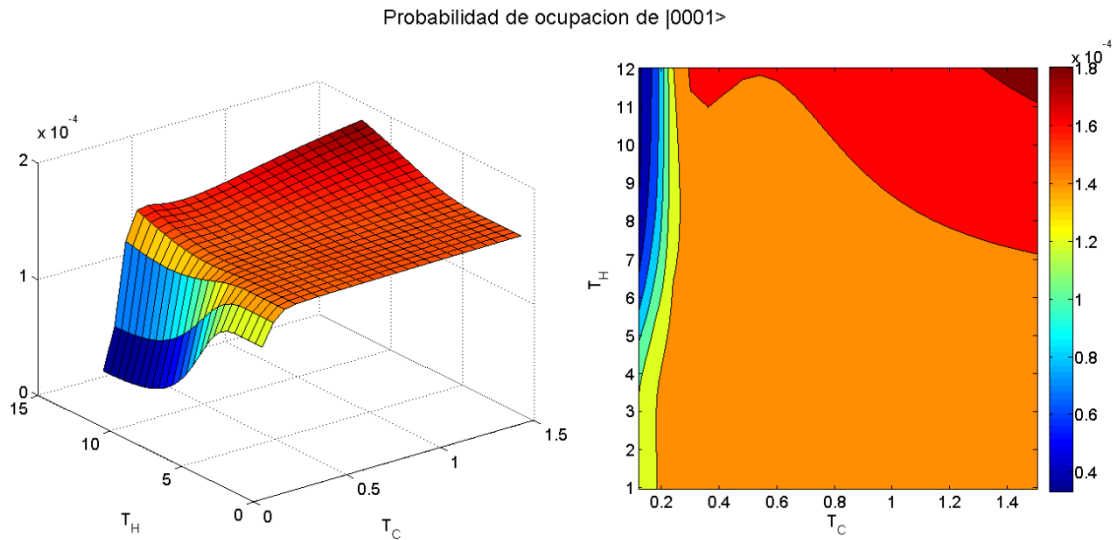


Figura 58 Probabilidad de ocupación QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el cuarto estado de $\rho^{(1)}$

Podemos observar en la figura 58 que el estado de sitio 4 como este es un estado que no va a producir valores relevantes al sistema, pues se encuentra la probabilidad con valores de diez a la menos cuatro, que para fines prácticos es cero.

Los parámetros utilizados en esta sección son los siguientes: el valor para del tuneleo (t) fue de 0.1eV, los valores de los potenciales coulombianos se fijaron en 2 para el diagonal y 12 para el perpendicular, la temperatura T_R se mantuvo con el valor de 2. El valor del potencial químico μ es de -0.1eV (energía del estado base de un electrón para el tuneleo seleccionado), y para las energías de sitio fueron todas iguales y con valor cero.

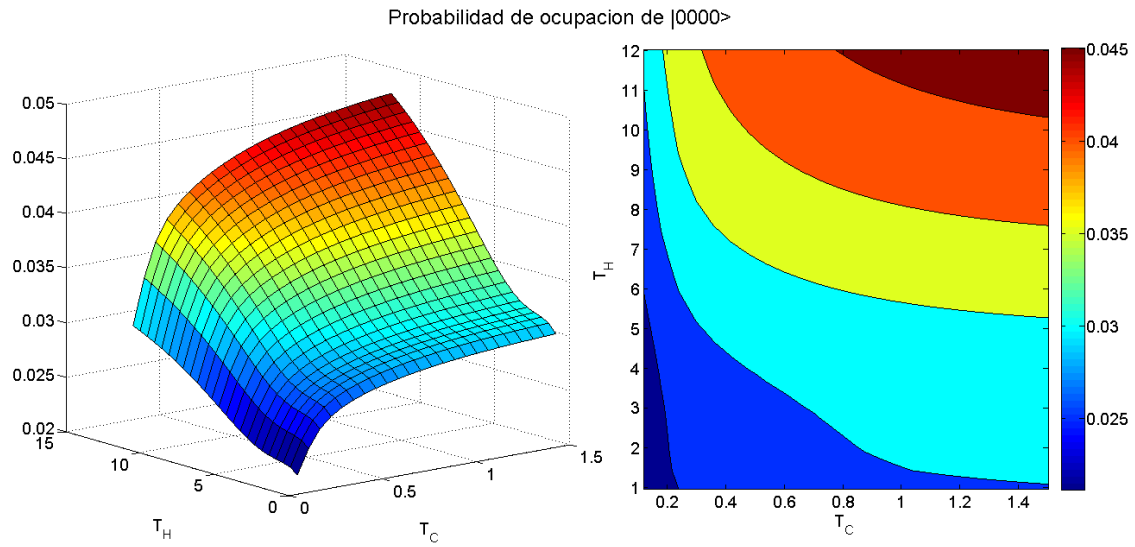


Figura 59 Probabilidad de ocupación de no tener electrones como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha)

En la figura 59, es la probabilidad de ocupación del estado vacío vemos solo tiene probabilidad de ocupación cuando las temperaturas tienen sus valores máximos, aunque si observamos el eje de probabilidad, el estado tiene muy baja probabilidad de existir.

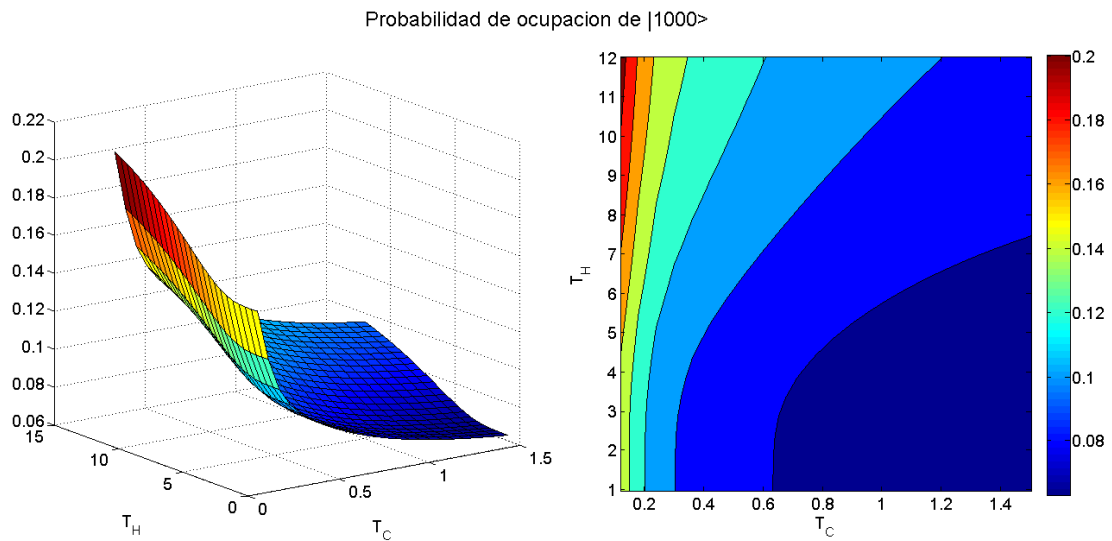


Figura 60 Probabilidad de ocupación de QD1 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el primer estado de $\rho^{(1)}$

En la figura 60 se presenta la ocupación en el punto cuántico uno donde la probabilidad es mayor cuando el sistema se encuentra con una temperatura T_H alta y se mantiene la temperatura fría baja, de otro modo la ocupación para este estado es muy pequeña.

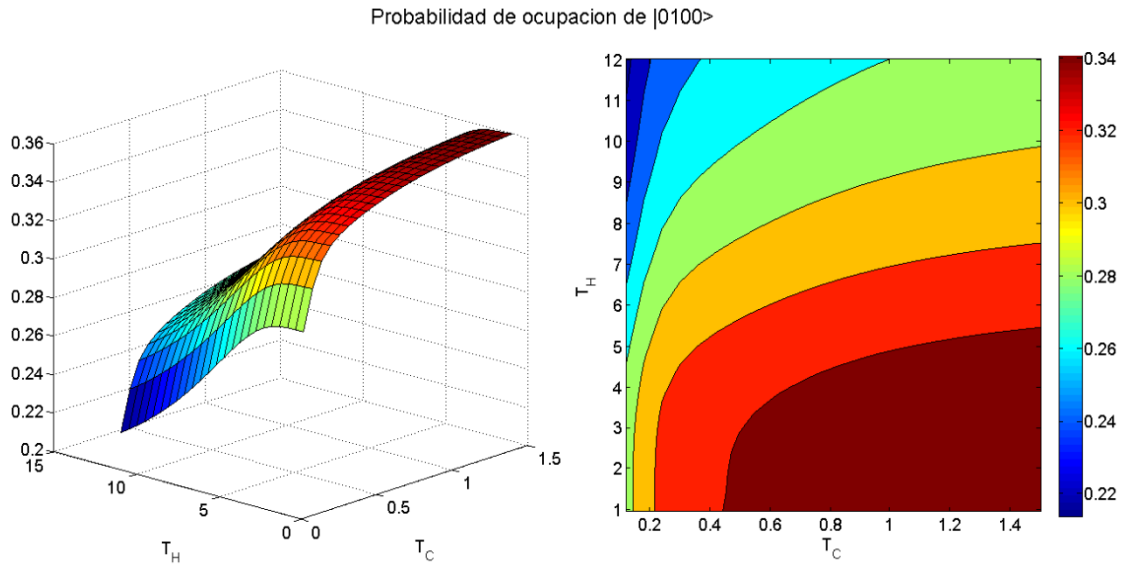


Figura 61 Probabilidad de ocupación QD2 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el segundo estado de $\rho^{(1)}$

En comparación, en la figura 61 se observa como para el sitio QD2 la probabilidad de ocupación tiene una tendencia a ser mayor conforme la temperatura fría sea alta y la caliente baja.

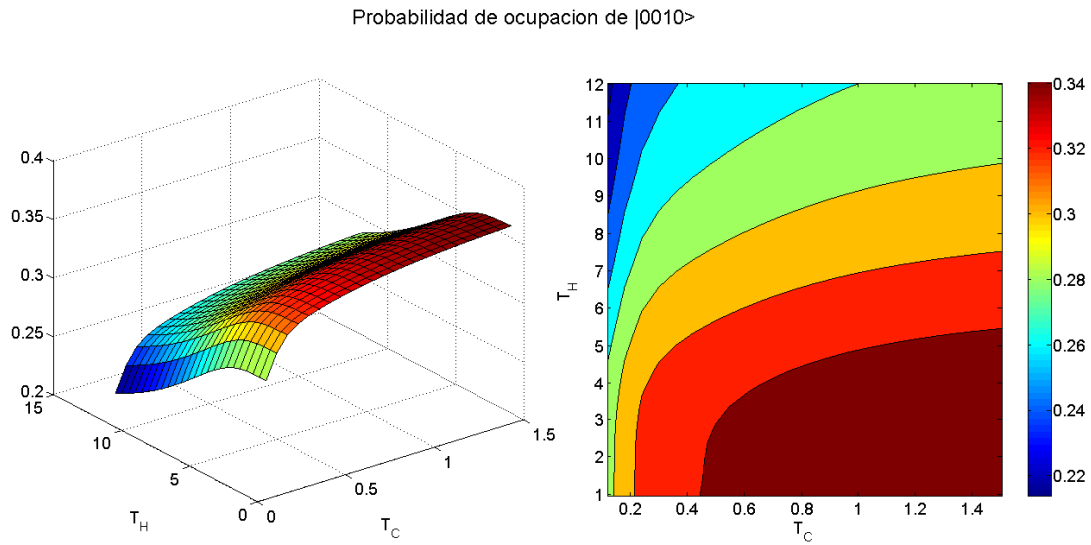


Figura 62 Probabilidad de ocupación QD3 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el tercer estado de $\rho^{(1)}$

Podemos observar en la figura 62 que para el sitio QD3 la ocupación de este estado como función de la temperatura es similar al estado QD2, esto es que a medida que la temperatura caliente sea menor, mayor será la probabilidad de ocupación para este estado.

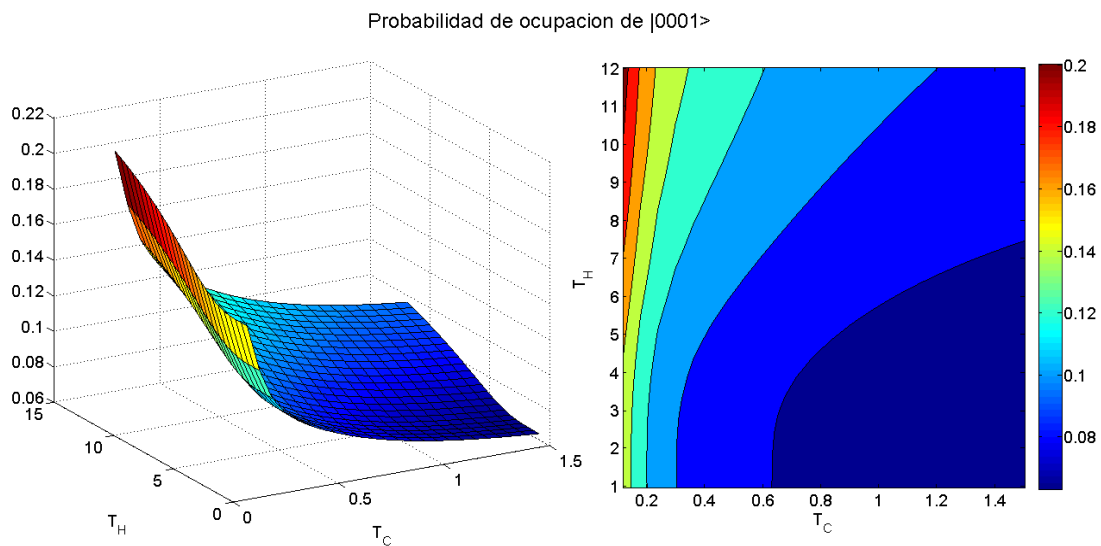


Figura 63 Probabilidad de ocupación del QD4 como función de T_H y T_C . En 3D (figura de la izquierda) y mapa de color (derecha) para el cuarto estado de $\rho^{(1)}$

Finalmente, para la figura 63 se observa como la ocupación del QD4 existe a medida que la temperatura caliente sea máxima y esta probabilidad va ir decayendo conforme T_H tiene un valor más bajo

Estas probabilidades no muestran resultados tan relevantes, pero son necesarios, ya que se determinó que en el modelo está vacío, y luego entra un electrón al sistema para que finalmente entre el segundo electrón.