

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS



MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA

TRANSPORTE DE CARGA Y ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO EN
SISTEMAS BIPARTITOS DE $\text{ESPÍN-}\frac{1}{2}$

TESIS

que para cubrir los requisitos necesarios para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

Presenta:

ANDREA JANETH HERNÁNDEZ AVIÑA

Ensenada, Baja California, México, Febrero de 2024

TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS PRESENTADA POR

Andrea Janeth Hernández Aviña

APROBADO POR:



Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar

Director del Comité



Dr. Roberto Romo Martínez

Miembro del Comité



Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova

Miembro del Comité

Febrero de 2024

RESUMEN de la tesis de **ANDREA JANETH HERNÁNDEZ AVIÑA**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de MAESTRO EN CIENCIAS . Ensenada, Baja California, Febrero de 2024.

TRANSPORTE DE CARGA Y ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO EN SISTEMAS BIPARTITOS DE ESPÍN- $\frac{1}{2}$

Resumen aprobado por:


Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar

Director de Tesis

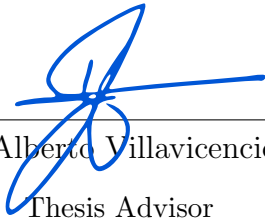
Se presenta un estudio de las propiedades de transporte de carga y del entrelazamiento cuántico en un sistema abierto compuesto de dos dímeros acoplados y conectados a contactos eléctricos con razones de tunelamiento constantes, Γ . Esto es, el sistema está compuesto de dos celdas con dos sitios cada una, caracterizado por tuneleos intracelda e inter-celda. Dicho modelo se basa en un sistema de dos fermiones de espín- $\frac{1}{2}$ con acoplamiento J en presencia de un campo magnético B . Se demuestra que dicho sistema es equivalente a un arreglo lineal de cuatro puntos cuánticos, y es por esto que los tuneleos y las energías de sitio se expresan en términos de la magnitud y dirección de B , así como de J . Se derivan expresiones analíticas exactas para la corriente y las poblaciones a partir de la solución de la ecuación de Lindblad en el régimen estacionario. Los resultados revelaron dos regímenes de comportamiento distintos para la corriente como función de J y de la razón B/Γ . Se observó una estabilización de la corriente a un valor fijo dependiente de J y un comportamiento asintótico hacia $I = \Gamma/5$ independiente de J para J/Γ tendiendo a infinito. El estudio del grado de entrelazamiento utilizando la concurrencia reveló la presencia de dos máximos distintos, cuya existencia y características están claramente influenciadas por J y Γ . A medida que J se aproxima a Γ , se observa una disminución en la intensidad del segundo máximo de concurrencia hasta su desaparición, marcando una transición en el comportamiento del entrelazamiento. Mediante un estudio complementario de las poblaciones y de la corriente se demuestra que el sistema de dos dímeros acoplados experimenta una reorganización de los estados cuánticos al incrementar el parámetro B . Esta reorganización ocurre cuando $J < \Gamma$, resultando en un comportamiento idéntico al de dos puntos cuánticos acoplados con dos niveles cada uno, confirmado por las fórmulas analíticas de las respectivas corrientes. Se introduce una parametrización en la ecuación de Lindblad para simplificar el análisis de la corriente electrónica, representada mediante $\tilde{I} = I/(B/2)$. Este enfoque reduce los parámetros necesarios, destacando el papel clave de Γ_D en maximizar la intensidad de la corriente. Además, se encuentra que una mayor corriente en el sistema resulta en una concurrencia mínima o nula, proporcionando información valiosa para el transporte electrónico. Esta área de estudio es fundamental para comprender la manipulación y control de sistemas cuánticos complejos mediante el ajuste de parámetros externos, siendo de gran relevancia en el ámbito de la información y computación cuántica.

Palabras Clave: Puntos cuánticos, concurrencia, cúbit, corriente electrónica.

ABSTRACT of the thesis presented by **ANDREA JANETH HERNÁNDEZ AVIÑA**, in partial fulfillment of the requirements of the degree of MASTER IN SCIENCES . Ensenada, Baja California, Febrero 2024.

**CHARGE TRANSPORT QUANTUM ENTANGLEMENT IN
BIPARTITE SPIN $\frac{1}{2}$ SYSTEMS**

Approved by:



Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar
Thesis Advisor

This study analyzes charge transport properties and quantum entanglement in a system composed of two coupled dimers connected to electrical contacts with constant tunneling ratios, Γ . That is, the system consists of two cells, each with two sites characterized by intra-cell and inter-cell tunneling. The model is based on a system of two spin- $\frac{1}{2}$ fermions with coupling J in the presence of a magnetic field B . This system is equivalent to a linear array of four quantum dots, where tunneling and site energies depend on the magnitude and direction of B and J . We derive exact analytical expressions for the current and populations by solving the steady-state Lindblad equation. The results revealed two distinct regimes of current behavior based on the coupling J and the ratio B/Γ . We find a stabilization of the current at a fixed value dependent on J and an asymptotic behavior towards $I = \Gamma/5$, independent of J for J/Γ tending to infinity. The study on entanglement using concurrence showed two clear peaks significantly affected by the values of parameters J and Γ . As the value of J gets closer to that of Γ , the intensity of the second peak decreases until it disappears. Additionally, a complementary study of the populations and current demonstrates that the system of two coupled dimers undergoes a reorganization of quantum states with increasing B . This reorganization occurs when $J < \Gamma$, and the system behaves like one of two coupled quantum dots with two levels each, verified through analytical formulas for the corresponding currents. We introduce a parameterization of the Lindblad equation to simplify the analysis of electronic current, represented by $\tilde{I} = I/(B/2)$. This approach reduces the necessary parameters, highlighting the crucial role of Γ_D in maximizing the current intensity. Furthermore, we show that a higher current in the system results in minimal or zero concurrence, providing valuable information for electronic transport. This field of study is essential for understanding the manipulation and control of complex quantum systems through adjusting external parameters, and it is highly relevant in the context of quantum information and quantum computing.

Keywords: Quantum dots, concurrence, qubit, electronic current.

Dedicada

A mis padres, por su amor incondicional. Por sus sacrificios y su apoyo constante que han sido la clave de mi éxito.

Agradecimientos

Deseo expresar mi agradecimiento a mi asesor el Dr. Jorge Villavicencio por la dirección de esta tesis, por el apoyo brindado para su realización.

Expreso también mi agradecimiento a los doctores Roberto Romo y Jesús Maytorena por su participación como miembros del comité.

A mis amigos Giselle, Josue, Sandy y Mauricio por su gran apoyo emocional durante los últimos años.

Al amor de mi vida, por su paciencia y apoyo incondicional.

Finalmente, doy las gracias al CONACyT por el apoyo económico brindado para la realización de este trabajo.

Contenido

	Página
Resumen en español	i
Resumen en inglés	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Contenido	v
Lista de Figuras	vii
Lista de Tablas	xi
I. INTRODUCCIÓN	1
I.1 Computación cuántica	4
I.2 Puntos cuánticos	5
I.3 El entrelazamiento	12
I.4 Estructura de la tesis	15
II. MARCO TEÓRICO	17
II.1 Matriz de densidad	17
II.2 Matriz de densidad y sus propiedades	18
II.2.1 Propiedades de la matriz de densidad	18
II.3 El bit cuántico o cúbit	19
II.3.1 Representación en la esfera de Bloch	21
II.3.2 Sistemas bipartitos de dos cúbits	22
II.4 Entrelazamiento	24
II.4.1 Definiciones	25
II.4.2 Concurrencia	26
II.5 Sistemas cuánticos abiertos	28
II.5.1 Modelos de puntos cuánticos acoplados	29
II.5.2 Sistema de cuatro puntos cuánticos acoplados	32
II.5.3 Sistema de dos puntos cuánticos acoplados con dos niveles cada uno	33
III. Modelo de dos dímeros acoplados	35
III.1 Parametrización	40
IV. Resultados	41
IV.1 Corriente en un cuádruple punto cuántico	42

Contenido (continuación)

	Página
IV.2 Poblaciones	51
IV.3 Concurrencia	54
IV.4 Corriente electrónica y concurrencia para el sistema parametrizado .	58
V. CONCLUSIONES	65
REFERENCIAS	69
A. Derivación de la ecuación de Lindblad	75

Lista de Figuras

Figura		Página
1	Ley de Moore	2
2	Puntos cuánticos verticales y laterales	6
3	Forma esquematizada de un punto cuántico.	7
4	Puntos cuánticos laterales definidos de manera electrostática	9
5	Doble punto cuántico en paralelo.	11
6	Representación de Bloch de un cúbit $ \psi\rangle$	21
7	Modelo de dos puntos cuánticos en un sistema abierto acoplado a contactos eléctricos mediante una fuente (S) y un sumidero (D), con razones de tuneleo Γ_S y Γ_D , y un tuneleo entre los sitios $ 1\rangle$ y $ 2\rangle$ dado por τ	30
8	Modelo de cuatro puntos cuánticos en un sistema abierto acoplado a contactos eléctricos mediante una fuente (S) y un sumidero (D), con razones de tuneleo Γ_S y Γ_D y tuneleos entre los sitios dados por τ_{12} , τ_{23} y τ_{34}	32
9	Modelo de dos puntos cuánticos con dos niveles cada uno acoplados a contactos eléctricos mediante fuentes (S) y un sumideros (D), con razones de tunelamiento $\Gamma_L^{-,+}$ y $\Gamma_r^{-,+}$ y tuneleos entre los puntos dados por τ_- y τ_+	33
10	Modelo de dos dímeros en donde los puntos cuanticos estan representados por los círculos en color naranja. Los tuneleos intracelda e intercelda están dados por B y J , respectivamente	36
11	Modelo de dos dímeros en donde los dos sitios por celda corresponden a los átomos A y B representados por círculos en color naranja y azul, respectivamente. Los tuneleos intracelda e intercelda están dados por v y w	38
12	Corriente electrónica I' como función del tuneleo B para un valor fijo de $\Gamma = 1$ y distintos valores del acoplamiento: $J = 0.5$ (línea negra continua), $J = 1$ (línea roja a trazos), $J = 5$ (línea azul a trazos) y $J = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).	43
13	Corriente electrónica I' como función del tuneleo B con un valor de $\Gamma = 5$. $J = 0.5$ (línea negra continua), $J = 1$ (línea roja a trazos), $J = 5$ (línea azul a trazos) y $J = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).	44

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
14	Corriente electrónica I' como función del tuneleo B con un valor de $\Gamma = 10$. $J = 0.5$ (línea negra continua), $J = 1$ (línea roja a trazos), $J = 5$ (línea azul a trazos) y $J = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).	45
15	Corriente electrónica I' como función del tuneleo B con un valor de $\Gamma = 10$. $J = 0.5$ (línea negra continua), $J = 1$ (línea roja a trazos), $J = 50$ (línea azul a trazos) y $J = 100$ (línea magenta a trazos y puntos).	46
16	Corriente electrónica I' como función del tuneleo J para el caso $\Gamma = 1$, para diferentes valores del campo magnético: $B = 0.5$ (línea negra continua), $B = 1$ (línea roja a trazos), $B = 5$ (línea azul a trazos) y $B = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).	47
17	Corriente electrónica I' como función del tuneleo J para un valor fijo $\Gamma = 5$, y los siguientes valores: $B = 0.5$ (línea negra continua), $B = 1$ (línea roja a trazos), $B = 5$ (línea azul a trazos) y $B = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).	48
18	Corriente electrónica I' como función del tuneleo J para un valor fijo de $\Gamma = 10$, y los siguientes valores: $B = 0.5$ (línea negra continua), $B = 1$ (línea roja a trazos), $B = 5$ (línea azul a trazos) y $B = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).	48
19	Corriente electrónica I' como función del tuneleo J para $\Gamma = 10$ y los siguientes valores: $B = 150$ (línea azul a puntos) y $B = 200$ (línea magenta continua). La línea roja a trazos corresponde al valor asintótico de la corriente electrónica $I' = 2.0$.	49
20	Mapa de densidad para la corriente electrónica con diferentes valores de Γ : (a) $\Gamma = 0.5$, (b) $\Gamma = 1$, (c) $\Gamma = 5$ y (d) $\Gamma = 10$. Se puede apreciar en los casos (a)-(d) cómo la corriente alcanza los valores asintóticos de $\Gamma/5$.	50
21	Poblaciones como función del campo magnético B , para un sistema de dos dímeros acoplados con $\theta = \pi/2$, así como (a) $\Gamma = 1$, $J = 1$, y (b) $\Gamma = 3$, $J = 1$.	51
22	Corriente como función del tuneleo J con un valor de $\Gamma = 1$. La línea negra sólida corresponde a la corriente $I_{B \rightarrow \infty}$ y la línea azul a trazos a I_{dd} .	53
23	Poblaciones como función del campo magnético B , para un sistema de dos dímeros en la dirección $\theta = \pi/2$ con (a) $\Gamma = 1$, $J = 2$, y (b) $\Gamma = 1$, $J = 4$.	54

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
24	Concurrencia $\mathcal{C}(\rho)$ (línea negra solida) y corriente electrónica I' (línea azul a trazos) como función de B , para valores de $\Gamma = 4$. (a) $J = 1$, (b) $J = 1.04$, (c) $J = 1.5$ y (d) $J = 2$. En general la concurrencia varía en el intervalo $\mathcal{C}(\rho) \in [0, 1]$	55
25	Concurrencia $\mathcal{C}(\rho)$ (línea negra solida) y corriente electrónica I' (línea azul a trazos) como función de B , para valores fijos de $J = 3$. (a) $\Gamma = 1$, (b) $\Gamma = 2$, (c) $\Gamma = 3$ y (d) $\Gamma = 4$	56
26	Poblaciones como función del campo magnético B para un sistema de dos dímeros con $\Gamma_D = \Gamma_S = 4$, $J = 1$ y $\theta = \pi/2$. La línea roja corresponde a ρ_{44} , la línea azul a trazos a ρ_{33} , la línea magenta a trazos a ρ_{11} y la línea verde punteada a ρ_{22}	57
27	Poblaciones como función del campo magnético B para un sistema de dos dímeros con $\Gamma_D = 1$, $J = 5$ y $\theta = \pi/2$. La línea roja corresponde a ρ_{44} , la línea azul a trazos a ρ_{33} , la línea magenta a trazos a ρ_{11} y la línea verde a puntos a ρ_{22}	58
28	Corriente electrónica \tilde{I} como función de g para diferentes valores de Γ_D : (a) $\Gamma_D = 0.5$, (b) $\Gamma_D = 1$, (c) $\Gamma_D = 5$ y (d) $\Gamma_D = 10$. Se grafican en cada inciso tres posibles direcciones. $\theta = \pi/4$ (línea negra continua), $\theta = \pi/2$ (línea azul a trazos) y $\theta = 3\pi/8$ (línea roja a puntos).	60
29	Corriente máxima como función de $\Gamma_{D_{max}}$ para distintos valores de la dirección del campo: $\theta = \pi/4$ (línea negra continua), $\theta = \pi/2$ (línea azul a trazos) y $\theta = 3\pi/8$ (línea roja a puntos).	61
30	Mapa de densidad de la corriente electrónica I como función de Γ_D y g para las siguientes direcciones: (a) $\theta = \pi/2$, (b) $\theta = \pi/4$, (c) $\theta = 3\pi/8$ y (d) $\theta = 5\pi/7$	62
31	Corriente electrónica (línea azul a puntos) y concurrencia (línea negra continua) como función del parámetro g , para un valor fijo de $\theta = \pi/2$. (a) $\Gamma = 1$, (b) $\Gamma = 2$, (c) $\Gamma = 5$ y (d) $\Gamma = 10$. La línea roja corresponde a $g = \sqrt{2}$	63
32	Mapa de densidad de la concurrencia $\mathcal{C}(\rho)$ como función de Γ_D y g , para diferentes valores θ dados por: (a) $\theta = \pi/2$, (b) $\theta = \pi/4$, (c) $\theta = 3\pi/8$ y (d) $\theta = 5\pi/7$. La línea roja a puntos corresponde al valor de g_{max} dada por la ecuación (75).	64

- 33 Sistema total (perteneciente a un espacio de Hilbert \mathcal{H}_T , con estados descritos por matrices de densidad ρ_T , y con dinámica determinada por un hamiltoniano H_T) dividido en el sistema de interés, sistema y el entorno. 76

Lista de Tablas

Tabla	Página
I Máximos de corriente electrónica \tilde{I} para distintos valores de θ y Γ , en donde $\Gamma_{D_{max}} = 2.6591$ para el cual $I_{max}(\Gamma_{D_{max}})$ es máxima independientemente del valor de θ	61

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

En la segunda mitad del siglo XX, presenciamos una revolución basada en la lógica digital y la electrónica. Desde el surgimiento del primer transistor hasta la creación de microprocesadores de las computadoras modernas, la mayoría de los dispositivos electrónicos han adoptado una lógica que utiliza dígitos binarios, conocidos como bits, para representar información. Un bit es un dígito del sistema de numeración binario, que se representa con dos valores, el 0 y el 1. El bit se utiliza para representar la contraposición entre dos valores (apagado y encendido, falso y verdadero, abierto y cerrado).

Esta lógica sencilla ha impulsado el desarrollo de tecnologías que han dado lugar a una industria global, y sus productos se han vuelto omnipresentes en nuestra sociedad. El avance continuo en microelectrónica se ha visto impulsado por la creciente demanda de tecnologías de la información y comunicación, que buscan constantemente mejorar la capacidad de memoria, el poder de cálculo y las capacidades de procesamiento y transmisión de señales.

El desarrollo de la industria hacia dispositivos más pequeños, más rápidos, más eficientes y más baratos ha sido impulsado desde hace más de 40 años por la llamada Ley de Moore formulada por Gordon Moore (cofundador en 1968 de la compañía Intel) en 1975. En dicha ley afirmó que “el número de transistores por centímetro cuadrado en un circuito integrado se duplicaría aproximadamente cada 18 a 24 meses”, esto es a medida que los dispositivos electrónicos se vuelven más pequeños y se integran más componentes en cada chip.

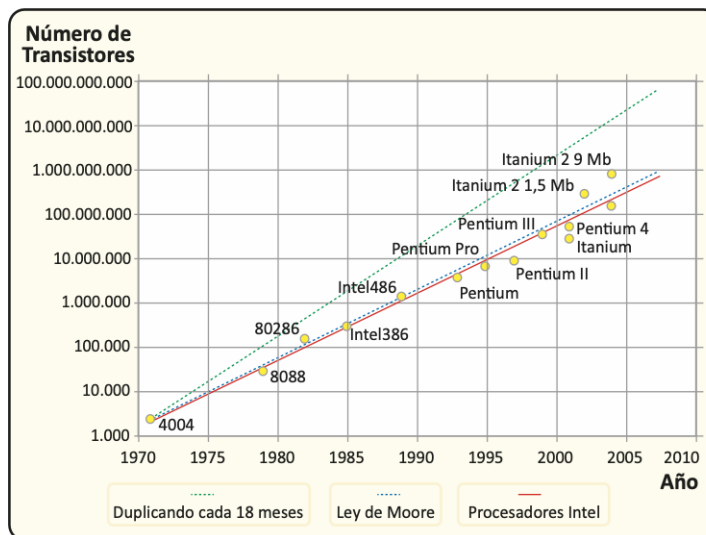


Figura 1: Gráfica de la Ley de Moore. La gráfica muestra la evolución del número de transistores o microchips intel en el tiempo.

Esta tendencia sólo es factible gracias a una reducción progresiva en el tamaño de los componentes electrónicos, y al hecho de que los transistores más pequeños pueden encenderse y apagarse con menos energía y operar a mayor velocidad.

Sin embargo, existe un desafío tecnológico y económico significativo debido a la aproximación al límite del tamaño atómico en la construcción de los chips. Por lo tanto, para lograr una mayor funcionalidad en los dispositivos, como el procesamiento y almacenamiento de información en un solo chip, los investigadores están explorando nuevas opciones. Una de estas es la nanoelectrónica, que se basa en la manipulación y organización de la materia a una escala muy pequeña, en el rango de 1 a 100 nanómetros. La nanoelectrónica promete superar las limitaciones de la microelectrónica tradicional y se basa en los principios de la física cuántica.

Este avance hacia la miniaturización de la electrónica se basa en la capacidad de medir, manipular y organizar materia a nivel de la nanoescala. A esta convergencia de

disciplinas se le conoce como nanociencia y nanotecnología. Las nanociencias se pueden describir como aquellas que estudian estructuras u objetos con al menos una de sus dimensiones en la escala del nanómetro (nm). El prefijo “nano” viene del latín “nanus”, que significa muy pequeño o enano, y un nanómetro corresponde a la millonésima parte de un milímetro. Para tener un punto de comparación podemos decir que un cabello humano tiene 100,000 nm de grueso, que el diámetro de una molécula de ADN es de 2.5 nm y que el diámetro de un átomo es de un tercio de nanómetro. Por otro lado, la nanotecnología correspondería a la capacidad técnica para modificar y manipular la materia para desarrollar estructuras o dispositivos funcionales con dimensiones inferiores a los 100 nm, para potenciales aplicaciones tecnológicas (Nalwa, 2000). Actualmente, las estructuras más pequeñas que se han alcanzado en transistores para circuitos integrados hechos en laboratorios de investigación van de los 10 a los 20 nanómetros, es decir, una décima parte de las dimensiones que encontramos actualmente dentro de los circuitos integrados comerciales.

Este avance hacia la nanoescala no sólo implica una miniaturización, sino también la consideración de fenómenos diferentes a los del mundo macroscópico utilizando la mecánica cuántica. Esta teoría, a diferencia de la mecánica clásica, describe el comportamiento de partículas a escalas atómicas y subatómicas, y ha proporcionado una base teórica sólida para comprender y optimizar dispositivos electrónicos a nivel microscópico. El efecto túnel, la superposición de estados, el entrelazamiento y la cuantización de la energía son sólo algunas de las características cuánticas que han sido explotadas en la microelectrónica para mejorar la eficiencia y la funcionalidad de los dispositivos.

Además, los efectos cuánticos en la nanoescala juegan un papel importante en la determinación de las propiedades de los electrones en estas nanoestructuras, que pueden diseñarse de manera que el movimiento de los electrones sea bidimensional, unidimen-

sional o incluso cero-dimensional. En este contexto, las estructuras cuánticas de baja dimensionalidad, como los pozos cuánticos, los alambres y los puntos cuánticos, son fundamentales para la nanoelectrónica y la nanotecnología. Dentro de este vasto campo de nanoestructuras, exploraremos en detalle la física de un tipo específico de estructura de baja dimensionalidad, conocida como el punto cuántico.

I.1 Computación cuántica

La computación cuántica es un campo innovador de la informática que utiliza principios de la mecánica cuántica para realizar cálculos de manera excepcionalmente rápida y eficiente en comparación con las computadoras clásicas. A diferencia de las computadoras tradicionales que utilizan bits para representar información como ceros y unos, las computadoras cuánticas utilizan cúbits (del inglés quantum bit o bit cuántico). Un cúbit es un sistema cuántico con dos estados propios y que puede ser manipulado arbitrariamente. Esto es, se trata de un sistema que sólo puede ser descrito correctamente mediante la mecánica cuántica. Su importancia radica en que la cantidad de información contenida en un cúbit, y, en particular, la forma en que esta información puede ser manipulada, es fundamental y cualitativamente diferente a la de un bit clásico. Hay operaciones lógicas, por ejemplo, que son posibles en un cúbit y no en un bit. Además, los cúbits aprovechan la propiedad de entrelazamiento, lo que significa que el estado de un cúbit está intrínsecamente relacionado con el estado de otro, sin importar la distancia entre ellos.

Estas características únicas de la computación cuántica tienen el potencial de revolucionar numerosas áreas, desde la criptografía y la simulación de sistemas cuánticos hasta la optimización de procesos y la resolución de problemas complejos en campos como la química y la inteligencia artificial.

A medida que la investigación en computación cuántica avanza, surgen desafíos significativos en el desarrollo de hardware y software cuántico. Sin embargo, se vislumbra un futuro emocionante en el que la computación cuántica podría abordar problemas actualmente intratables, lo que abriría nuevas oportunidades en la solución de problemas en múltiples disciplinas.

I.2 Puntos cuánticos

Como se mencionó anteriormente, en el presente trabajo exploraremos más a detalle la física de los puntos cuánticos. Un punto cuántico es una nanoestructura que ha revolucionado el mundo de la nanotecnología y la nanoelectrónica. Estas diminutas estructuras, miden solo unos pocos nanómetros de diámetro (Reed, 1993) y poseen propiedades físicas únicas que los diferencian de sus contrapartes macroscópicas. Estas nanoestructuras son una realización física artificial de un sistema de cero-dimensionalidad, el cual se refiere a una estructura o dispositivo en el que las partículas o electrones están confinados en todas direcciones, lo que significa que su movimiento se limita a un punto sin dimensiones espaciales. A los puntos cuánticos también se les conoce como átomos artificiales debido a que comparten algunas propiedades y comportamiento similares con los átomos reales, tales como niveles de energía discretos, propiedades de confinamiento, tamaño y control entre otros. (Kastner, 1993; Ashoori, 1996; McEuen, 1997; Kouwenhoven y Marcus, 1998)

Al tratarse de un sistema cuántico, la única forma en que los electrones que se encuentran confinados en el punto puedan escapar, es mediante el tuneo a través de las paredes. Este proceso se puede representar esquemáticamente en la figura 2, en donde un punto cuántico es representado por un disco acoplado a reservorios de electrones (en configuración vertical y lateral) vía barreras de tunelamiento, las cuales

permiten el intercambio de electrones.

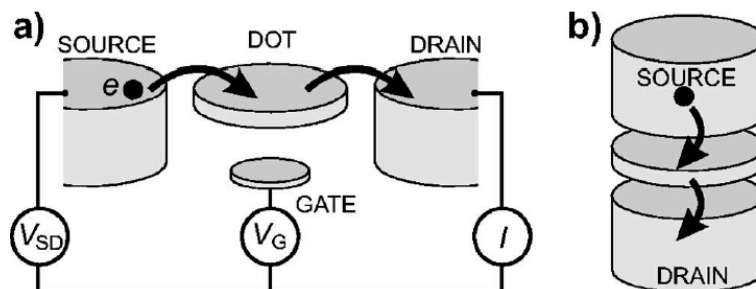


Figura 2: Forma esquematizada de un punto cuántico con geometría (a) lateral y (b) vertical. El punto cuántico (DOT, en inglés) es representado por un disco que se conecta a una fuente (SOURCE, en inglés) y a un colector (DRAIN, en inglés) via barreras de tunelamiento, lo que permite que la corriente I en el dispositivo pueda ser medida manipulando el voltaje V_{SD} y el voltaje de compuerta V_G . Recuperado de Hanson *et al.* (2007).

Este tunelamiento está determinado por las propiedades físicas del sistema, así como por las diferencias de potencial entre el interior y el exterior del punto cuántico. Una ventaja que tienen los puntos cuánticos sobre los átomos verdaderos es que, al poder fabricarlos a la medida, es posible controlar sus propiedades en forma muy precisa. Otra ventaja que ofrecen los puntos cuánticos, es que sus propiedades pueden manipularse mediante la aplicación de voltajes externos V_{SD} para investigar una gran variedad de efectos. Además, también es posible sintonizar el potencial electrostático del punto cuántico con respecto al de los reservorios, acoplándolo a uno o más electrodos de compuerta con voltaje V_G . Ver figura 2(a).

Existen diferentes tipos de puntos cuánticos, dependiendo tanto de los materiales como de las técnicas empleadas para su fabricación. Por ejemplo, podemos tener: moléculas atrapadas entre dos electrodos (Park *et al.*, 2002), metales normales (Petta

y Ralph, 2001; von Delft y Ralph, 2001), materiales superconductores (von Delft y Ralph, 2001), nanoalambres semiconductores (Björk *et al.*, 2004), granos metálicos o islas oscilantes (Gorelik *et al.*, 1998; Armour y MacKinnon, 2002; Villavicencio *et al.*, 2008), puntos cuánticos semiconductores verticales (Kouwenhoven *et al.*, 2001), puntos cuánticos semiconductores laterales (Kouwenhoven *et al.*, 1997) y nanotubos de carbón (Buitelaar *et al.*, 2002), por mencionar algunos.

En particular hablaremos con más detalle acerca de los puntos cuánticos de materiales semiconductores. Para fabricar este tipo de estructuras se utiliza la técnica de la epitaxia de haces moleculares (*molecular beam epitaxy (MBE)*, por sus siglas en inglés) (Mitin *et al.*, 2008) la cual consistente en una delgada capa plana de arseniuro de galio dopado con aluminio ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) depositada sobre una capa de arseniuro de galio (GaAs), como se muestra en la figura 3.

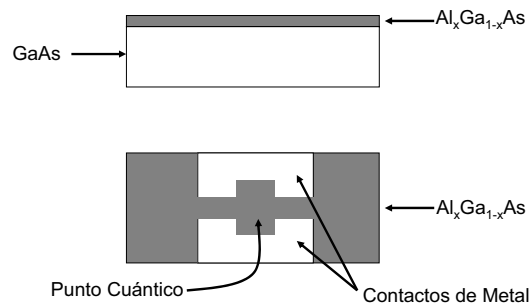


Figura 3: Forma esquematizada de un punto cuántico. Los dos contactos metálicos forman contactos puntuales cuánticos que aíslan al punto cuántico cuando se aplica voltaje. En ese momento los electrones solo pueden entrar al punto mediante tuneo.

Debido a la diferencia de anchos de banda de cada capa (Ferry y Goodnick, 1997), se produce un confinamiento de electrones en una de las dimensiones (la normal a ambas capas). Dichos electrones se acumulan en la interfaz de la heteroestructura de GaAs/AlGaAs, típicamente 50-100 nm bajo la superficie de los materiales, formando de esta manera un gas de electrones bidimensional (*2D electron gas* (2DEG), por sus siglas en inglés), la cual forma una hoja delgada de 10 nm en donde los electrones se mueven libremente a lo largo de la interfaz. La densidad de electrones en el 2DEG es muy baja, del orden de $2.9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (Hanson *et al.*, 2004). A esta estructura se le agregan además unos contactos de metal conocidos como *contactos puntuales cuánticos* (*quantum point contacts* (QPC), por sus siglas en inglés) para confinar, mediante voltajes, el movimiento de los electrones en las otras dos dimensiones y así crear al punto cuántico (ver figura 3).

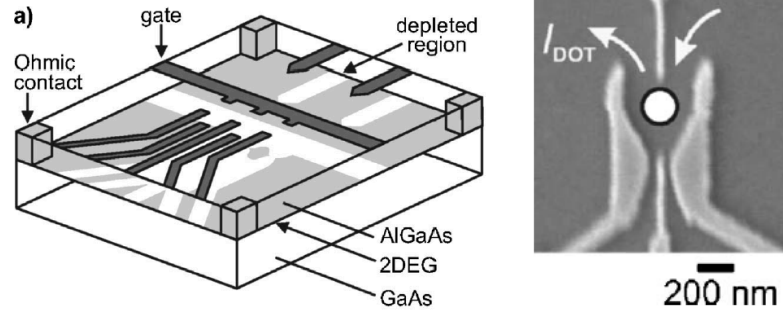


Figura 4: Puntos cuánticos laterales definidos de manera electrostática por electrodos metálicos en la superficie de una heteroestructura de GaAs/AlGaAs. (a) Vista esquemática en donde la aplicación de voltajes negativos en los electrodos metálicos de compuerta (gris oscuro) inducen regiones que presentan un vaciamiento de electrones (blanco) en el 2DEG (gris claro) mediante repulsión electrostática. Los contactos ohmicos (columnas en gris claro) permiten establecer contactos eléctricos con los reservorios del 2DEG mediante alambres (no se muestran en la figura). (b) Micrografía tomada con un microscopio electrónico de barrido de un dispositivo de un solo punto cuántico (posición ubicada con un círculo blanco) en donde se observan los electrodos de compuerta (gris claro) sobre la superficie (gris oscuro). Los contactos ohmicos se indican en las esquinas superiores. Las flechas blancas indican la trayectoria seguida por la corriente electrónica I_{DOT} desde un reservorio de electrones a otro pasando a través del punto cuántico. Recuperado de Hanson *et al.* (2007).

En la figura 4 podemos ver con mayor detalle un punto cuántico lateral, en donde los electrones libres en el 2DEG pueden ser manipulados mediante un campo eléctrico, el cual se crea mediante un diferencia de potencial negativa en los electrodos metálicos en la parte superior de la heteroestructura. Por otro lado, la técnica de litografía con haces de electrones permite fabricar estructuras de compuertas con dimensiones del orden de

décimas de nanómetros, que permiten controlar a los electrones en el sistema. Esto es, con un diseño adecuado de las estructuras de compuerta es posible crear pequeñas islas o “piscinas” de electrones aisladas del resto del gas de electrones bidimensional, lo que da lugar a los puntos cuánticos mediante un confinamiento electrostático. Las dimensiones de un punto cuántico son del orden de la longitud de onda de Fermi del material que lo compone, típicamente entre 10 nm y 1 micra (Burkard *et al.*, 1999). Finalmente, se agregan los contactos óhmicos a los reservorios del 2DEG, y para explorar los fenómenos cuánticos en dichas estructuras, estas se mantienen a temperaturas muy bajas. Las temperaturas de operación T generalmente utilizadas, van de 20 mK a 100 mK (Laird *et al.*, 2006; Fujisawa *et al.*, 2002).

El creciente desarrollo en las técnicas de fabricación de estas nanoestructuras ha permitido el acoplamiento de puntos cuánticos adyacentes formando moléculas artificiales. En este tipo de sistemas los electrones pueden tunelear entre puntos espacialmente separados, cuya interacción electrostática afecta fuertemente la distribución de carga (Tamura *et al.*, 2003). Por lo general las moléculas artificiales están constituidas por puntos cuánticos del tipo lateral debido a la relativa facilidad con la que pueden construirse (Figura 2.5), por lo que la aplicación de voltajes eléctricos a través de electrodos permite nuevamente el control de las barreras de tunelaje entre los puntos así como su espectro de energías (Brum y Hawrylak, 1997; Tamura *et al.*, 2003) sin embargo sus propiedades son diferentes a las de los puntos individuales. Una de las moléculas artificiales más comúnmente estudiada es conocida como doble punto cuántico, la cual está formada por dos puntos que pueden estar acomodados en serie o en paralelo (Tamura *et al.*, 2003; Van der Wiel *et al.*, 2002) como se muestra en la figura 5.

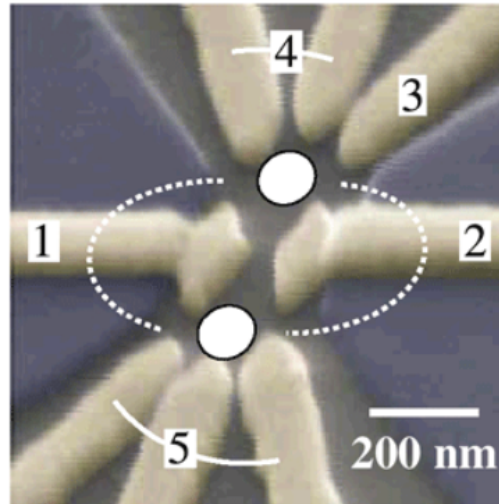


Figura 5: Doble punto cuántico en paralelo.

Motivados principalmente por la escalabilidad potencial de los puntos cuánticos, por la demostración del acoplamiento entre éstos y por su compatibilidad con las técnicas actuales de la microelectrónica, Loss y DiVincenzo (1998) combinaron los estudios referentes a la carga y al espín en estos sistemas, proponiendo el empleo del espín de un electrón confinado en un punto cuántico para representar a un cúbit con interesantes aplicaciones en el campo de la información cuántica.

Por otro lado, en los últimos años, se ha dedicado considerable atención al estudio de la generación de estados entrelazados en puntos cuánticos, principalmente desde una perspectiva teórica. La mayor parte de estos estudios se centra en el entrelazamiento de los espines electrónicos en estos puntos, aunque también existen propuestas relacionadas con el entrelazamiento de la carga. En particular, se ha investigado el entrelazamiento de dos electrones en un conjunto de puntos cuánticos acoplados, abordando tanto el grado de libertad del espín (Saraga y Loss, 2003; Solenov y Fedichkin, 2006), como el

grado de libertad de carga (Creffield y Platero, 2002; Chouikha *et al.*, 2003; L Fedichkin y Valiev, 2000; Tanamoto, 2000; Vorrath y Brandes, 2003) .

No obstante, a pesar de estas propuestas teóricas prometedoras, la demostración experimental de la generación y detección de entrelazamiento en sistemas de estado sólido sigue siendo un área poco explorada y en desarrollo.

I.3 El entrelazamiento

El entrelazamiento es un fenómeno puramente cuántico que ha revolucionado la comprensión de los fundamentos de la teoría cuántica y es universalmente aceptada (Audretsch, 2007). Se dice que dos partículas están entrelazadas si el estado cuántico de una no puede ser descrito independientemente del estado de la otra. En tal caso, el estado del sistema no es separable. Este fenómeno puede ser utilizado para probar los fundamentos de la teoría cuántica, y ha dado lugar a las áreas de la información y computación cuántica. El *entrelazamiento cuántico* ha sido observado experimentalmente en una gran variedad de sistemas físicos (Yao *et al.*, 2012; Hensen *et al.*, 2015; Arndt *et al.*, 1999), y se han desarrollado diferentes indicadores (Nielsen y Chuang, 2011), como lo son el número de Schmidt, la concurrencia y la entropía de Von Neumann.

La superposición es un ejemplo de los fenómenos cuánticos que no tienen análogo clásico, mediante el cual un sistema puede existir simultáneamente en diferentes estados. Un tipo especial de superposición puede ser presentado por dos o más sistemas cuánticos, tal que el estado del sistema total no puede describirse como un producto de los estados individuales de sus componentes. Cuando esto ocurre, se dice que las partículas están entrelazadas (Brooks, 1999; Nielsen y Chuang, 2000; Zeilinger, 1998).

El entrelazamiento describe correlaciones entre partículas (o sistemas cuánticos) que son mucho más fuertes que cualquier correlación clásica (Brooks, 1999). Como resul-

tado, las medidas realizadas sobre una de las partículas parecen influir instantáneamente sobre las otras con las que se encuentre entrelazada aun cuando éstas se encuentren espacialmente separadas, de tal forma que la información de los estados individuales se encuentra en sus propiedades conjuntas.

En los últimos años se ha demostrado que el entrelazamiento no es únicamente un concepto fundamental en la mecánica cuántica, sino que también representa la base de diversas aplicaciones tecnológicas potenciales.

El entrelazamiento tiene también un papel importante en diversos protocolos de comunicación basados en efectos cuánticos. Los más destacados incluyen el código denso (empleo de un cúbit para transmitir dos bits de información clásica) (Bennett y Wiesner, 1992; Bose *et al.*, 1998), la teleportación cuántica (transferencia de un estado cuántico de un sitio a otro mediante canales clásicos) (Pan *et al.*, 2000; Barrett *et al.*, 2004; Riebe *et al.*, 2004) y los protocolos de encriptación (en donde la seguridad de la información proviene del hecho de que cualquier intento por acceder a ella, a través de la medición en uno de los estados, inevitablemente perturba las correlaciones cuánticas) (David, 1985; Ekert, 1991). En particular, estos protocolos hacen uso de estados de dos partículas o cúbits que exhiben el máximo grado de entrelazamiento, conocidos como estados de Bell (Nielsen y Chuang, 2000; Pan *et al.*, 1998).

Estas notables aplicaciones potenciales del entrelazamiento han motivado una gran cantidad de estudios encaminados a la generación tanto del cúbit como de los estados entrelazados que puedan ser controlables (Plenio y Vedral, 1998; Quiroga y Johnson, 1999; Steane, 1998; Tamborenea y Metiu, 2001) y en los que el entrelazamiento pueda obtenerse ya sea mediante interacciones directas o indirectas entre los sistemas cuánticos.

Al tratar a los estados cuánticos como objetos matemáticos abstractos, se ha empleado el formalismo de la matriz de densidad para caracterizar a los sistemas y se

han sentado las bases que dichas matrices deben obedecer para representar estados entrelazados (Horodecki *et al.*, 2009; Mintert *et al.*, 2005; Vidal y Werner, 2002).

En particular, la caracterización del entrelazamiento en sistemas que se encuentran en una mezcla estadística de estados (o estados mixtos) se ha intentado mediante el empleo de diversas cantidades escalares que resultan difíciles de evaluar algebraicamente. En la actualidad únicamente la medida conocida como concurrencia, propuesta originalmente para sistemas de dos partículas por (Wootters, 1996) (y refinada posteriormente por Wootters), constituye una herramienta accesible para este fin.

En la práctica, uno de los principales impedimentos en la construcción de las computadoras cuánticas y en la implementación de los estados entrelazados se debe a la interacción de éstos con el ambiente, la cual puede afectar tanto al proceso mediante el cual se realizan operaciones sobre los cúbits como al resultado de la operación misma (Nielsen y Chuang, 2000; Rieffel y Polak, 2000; Unruh, 1995). Al fenómeno mediante el cual la superposición de los distintos estados de un sistema decae en un corto periodo de tiempo se le conoce como decoherencia. En general, una fuente de decoherencia intrínseca a los arreglos de puntos cuánticos es la interacción con fonones acústicos (Brandes y Kramer, 1999; L Fedichkin y Valiev, 2000).

En esta tesis estamos interesados en explorar la física del transporte de carga en un sistema de *dos dímeros acoplados* (János K. Asbóth y Pályi, 2016), los cuales están conectados a contactos eléctricos. En este esquema, el sistema puede visualizarse como un arreglo lineal de cuatro puntos cuánticos. El sistema propuesto es equivalente a un modelo tipo SSH (Asbóth *et al.*, 2016), y está inspirado en un *sistema bipartito* compuesto de dos partículas de espín- $\frac{1}{2}$ acopladas en presencia de un campo magnético dependiente del tiempo Yi *et al.* (2004). Es por esto que resulta de interés medir las *correlaciones cuánticas*, *i.e.*, la manifestación del grado de no-clasicidad de un sistema, usando medidas del entrelazamiento cuántico como la concurrencia. Al investigar este

problema, examinaremos la posible relación entre propiedades medibles experimentalmente, como la corriente electrónica, y cantidades intrínsecamente cuánticas, como el grado de entrelazamiento del sistema.

I.4 Estructura de la tesis

Para proporcionar una descripción detallada de la base teórica, de la metodología utilizada y de los resultados encontrados, hemos estructurado la tesis de la siguiente manera. En el capítulo II, proporcionamos una descripción general de los fundamentos de la computación cuántica, comenzamos por definir las propiedades de la matriz de densidad como el principal formalismo empleado a lo largo del trabajo para describir a los sistemas cuánticos. Posteriormente, se presentan las propiedades básicas de los cúbits, así como una descripción del entrelazamiento cuántico y la concurrencia. Finalmente, se presenta una deducción general de la ecuación de Lindblad para sistemas abiertos, y su aplicación a diversos sistemas cuánticos como lo son las configuraciones lineales de doble y cuádruple punto cuántico. El capítulo III se dedica a la presentación del modelo estudiado, el cual consiste en un arreglo de dos dímeros acoplados, conectados a contactos electrónicos (fuente y sumidero). Este sistema está basado en un modelo de dos fermiones de espín- $\frac{1}{2}$ con acoplamiento J en presencia de un campo magnético B aplicado a uno de los dímeros. Se discute cómo este sistema es equivalente al de un arreglo lineal de cuatro puntos cuánticos coplado a contactos eléctricos, en donde los tuneleos entre los puntos dependerán tanto de los parámetros de la magnitud y dirección del campo magnético B , así como de acoplamiento J . En el capítulo IV, se detallan los resultados obtenidos mediante el análisis tanto analítico como numérico de la corriente electrónica, y de las poblaciones, complementados con un estudio de la concurrencia como medida del grado de entrelazamiento. Además, se aborda el estudio

de la corriente electrónica y la concurrencia bajo una parametrización del hamiltoniano y de la ecuación de Lindblad. Por último, en el capítulo V se presentan las conclusiones finales de este trabajo y sugiere posibles direcciones para investigaciones futuras.

Capítulo II

MARCO TEÓRICO

En este capítulo, se presenta una introducción a antecedentes y conceptos generales que ayudan a contextualizar el trabajo de esta tesis. Dado que en esta investigación se utilizará principalmente el formalismo de la matriz de densidad para determinar el estado de sistemas cuánticos y obtener las observables de interés, comenzaremos definiendo el operador de densidad y se expondrán sus propiedades fundamentales.

Este enfoque inicial es esencial para establecer las bases teóricas necesarias para comprender y abordar los aspectos centrales de esta tesis. Proporciona una sólida comprensión de los conceptos clave que serán utilizados a lo largo de la investigación, tales como el bit cuántico o cúbit, el entrelazamiento, la concurrencia como una medida de este, los sistemas cuánticos abiertos y la descripción de la dinámica en estos sistemas mediante la ecuación de Lindblad.

II.1 Matriz de densidad

Una descripción alternativa a la ecuación de evolución temporal de Schrödinger es el formalismo de la matriz de densidad, el cual permite una descripción simple tanto de estados puros como de mezclas estadísticas de estados. La matriz de densidad contiene toda la información física disponible sobre el sistema del mismo modo en que la función de onda permite caracterizar a un estado cuántico. En particular este formalismo es muy práctico en la descripción de la coherencia, la evolución temporal de sistemas mixtos, el análisis de decoherencia y el estudio de entrelazamiento entre dos subsistemas (Blum, 1996; Moura Alves, 2005; de LLano, 1996).

II.2 Matriz de densidad y sus propiedades

Cuando un sistema cuántico se encuentra en un estado perfectamente determinado, se dice que está en un estado puro. En otras palabras, un estado puro está caracterizado por la existencia de un experimento de preparación en el que, con certeza, el sistema se encuentra en sólo un estado cuántico (Fano, 1957). El operador de densidad para un estado puro, $|\psi\rangle$, está definido como

$$\rho = |\psi\rangle \langle\psi|. \quad (1)$$

Si la función de onda se escribe como una combinación lineal de estados $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$, donde $\{|\phi_n\rangle\}$ forman una base completa ortonormal siendo c_n los coeficientes del desarrollo, los elementos de matriz de ρ en esta base son:

$$\rho_{nm} = \langle\phi_m|\rho|\phi_n\rangle = c_m^* c_n, \quad (2)$$

por lo que podemos expresar al operador de densidad como,

$$\rho = \sum_{n,m} c_m^* c_n |\phi_m\rangle \langle\phi_n| = \sum_{n,m} \rho_{mn} |\phi_m\rangle \langle\phi_n|. \quad (3)$$

La proyección del operador de densidad en dicha base nos permite obtener los elementos de matriz para estados puros, donde los elementos de la diagonal $\rho_{nn} = |c_n|^2$ representan la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|\phi_n\rangle$. Es por esto que a los elementos ρ_{nn} se les conoce como poblaciones, mientras que a los elementos que se encuentran fuera de la diagonal ρ_{nm} se les conoce como coherencias y representan los efectos de interferencia entre los estados $|\phi_m\rangle$ y $|\phi_n\rangle$.

II.2.1 Propiedades de la matriz de densidad

Una matriz ρ , se dice que es una matriz densidad sí y sólo sí satisface las siguientes propiedades:

- La matriz densidad es un operador hermitiano: $\rho^\dagger = \rho$. Sus elementos de matriz en una base satisfacen:

$$\rho_{nm} = \langle n | \rho | m \rangle = \langle m | \rho | n \rangle^* . \quad (4)$$

- Debido a que los elementos de la diagonal representan una probabilidad, la traza de la matriz de densidad debe estar normalizada: $\text{Tr}(\rho) = 1$
- La matriz de densidad ρ es un operador definido positivo: $\langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0$ para cualquier ket $|\phi\rangle$ del espacio de estados.
- El operador de densidad para estados puros cumple con $\rho^2 = \rho$.
- El operador de densidad para estados mixtos obedece $\rho^2 \neq \rho$.
- De las propiedades anteriores vemos que $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$. Esto nos permite nos permite identificar si un sistema cuántico es un estado puro [$\text{Tr}(\rho^2) = 1$] o un estado mixto [$\text{Tr}(\rho^2) < 1$].
- $\text{Tr}(\rho^2)$ es la pureza de los estados y satisface $\frac{1}{d} \leq \text{Tr}(\rho^2) \leq 1$, en donde d es la dimensión de H .

II.3 El bit cuántico o cúbit

En computación clásica, la unidad fundamental de información es el “bit”, el cual toma solamente dos valores, comúnmente representados por 0 y 1. Por lo tanto, en teoría de la información clásica, un bit se define como la información obtenida cuando se conoce el valor de una variable aleatoria que tiene asociados dos resultados posibles con igual probabilidad. Existe el análogo cuántico del bit clásico.

En teoría de la información cuántica, la unidad fundamental de información es el bit cuántico o “cúbit” (del inglés “quantum bit”), se trata del ejemplo más simple de

un sistema cuántico. El cúbit existe en un espacio de Hilbert de dimensión dos, por lo que es un sistema cuántico de dos niveles (Nielsen y Chuang, 2011; Bennett, 1995).

Al medirlo, el cúbit tiene dos resultados posibles, $|0\rangle$ y $|1\rangle$, los cuales se representan en la base estándar, también llamada base computacional, como

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Cada uno de estos niveles, a los que nos referiremos como 0 y 1, pueden emplearse para representar los valores lógicos clásicos 0 y 1. Sin embargo, a diferencia del bit clásico (abreviatura de binary digit), el cúbit puede encontrarse en cualquier superposición de los dos estados:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (6)$$

en donde α y β corresponden a las amplitudes de probabilidad de dichos niveles y cumplen con la condición de normalización $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. La ecuación (6) describe una superposición coherente de estados, si se mide el cúbit, éste se encontrará con probabilidad $|\alpha|^2$ en el estado $|0\rangle$ y con probabilidad $|\beta|^2$ en el estado $|1\rangle$.

Otra característica que lo distingue de un bit clásico es que diferentes cúbits pueden entrelazarse con el objeto de realizar diversas operaciones computacionales o procesos de comunicación cuántica (Nielsen y Chuang, 2011; Bennett *et al.*, 1996; Schumacher, 1995).

En principio, un cúbit puede representarse mediante cualquier sistema de dos niveles “natural”, como por ejemplo partículas con espín 1/2, dos estados de polarización diferentes de un fotón, entre otros (Brooks, 2012; Nielsen y Chuang, 2000; Rieffel y Polak, 2000; Hu *et al.*, 2005).

II.3.1 Representación en la esfera de Bloch

Existe una correspondencia uno a uno entre estados puros de un cúbit y los puntos cuánticos en la esfera de radio 1 en \mathfrak{R}^3 . Es posible parametrizar el vector de estado y, de esta forma obtener una representación geométrica del estado de un cúbit:

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle + \text{sen}\frac{\theta}{2} e^{i\phi} |1\rangle, \quad (7)$$

donde $\theta, \phi \in \mathfrak{R}$, $0 \leq \theta \leq \pi$ y $0 \leq \phi \leq 2\pi$. En esta esfera, el polo norte representa $|0\rangle$ y el polo sur, $|1\rangle$. Los parámetros θ y ϕ definen un punto en la superficie de la esfera. Para casi todos los estados $|\psi\rangle$ existe una única manera de asignar los parámetros de θ y ϕ . Las únicas excepciones son los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$, que corresponden a $\theta = 0$ y $\theta = \pi$ respectivamente, en ambos casos ϕ no afecta el estado físico. Esta visualización geométrica de los estados puros de un cúbit se conoce como representación de Bloch que se muestra en la figura 6.

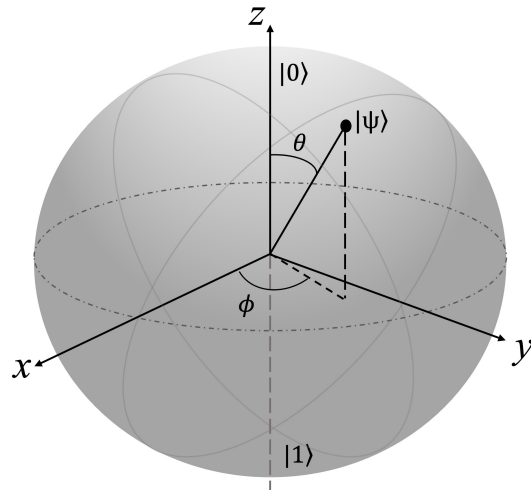


Figura 6: Representación de Bloch de un cúbit $|\psi\rangle$.

Por otro lado, el cúbit podría encontrarse en un estado mezcla, con cierta probabilidad de estar en el estado $|1\rangle$ o $|0\rangle$. En este caso el cúbit se puede representar

por ρ (matriz de 2×2), utilizando las matrices de Pauli. El conjunto de matrices $\{\mathbf{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$, forman una base completa de las matrices hermitianas de 2×2 . Por lo tanto, los estados mezcla de un cúbit pueden expresarse como,

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1}_2 + \vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \quad (8)$$

donde $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z) \in \mathfrak{R}^3$ es el vector de Bloch que satisface $|\vec{n}|^2 \leq 1$ y $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, con

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9)$$

Teniendo en cuenta las propiedades de la matriz de densidad mencionadas anteriormente y calculando la traza de ρ^2 , podemos mostrar que:

$$\text{Tr}(\rho^2) = \frac{1 + |\vec{n}|^2}{2}. \quad (10)$$

De la ecuación (10) podemos observar que si $|\vec{n}|^2 = 1$, ρ es un estado puro, mientras que si $|\vec{n}|^2 \leq 1$, ρ es una mezcla y se encuentra descrito por un punto que pertenece al interior de la esfera de Bloch.

II.3.2 Sistemas bipartitos de dos cúbits

En la mecánica cuántica, un sistema cuántico bipartito es un sistema cuántico que consta de dos subsistemas. El estado del sistema cuántico bipartito se describe mediante una matriz de densidad que es el producto tensorial de las matrices de densidad de los dos subsistemas.

El estado de un sistema cuántico bipartito puede ser puro o mixto. Un estado puro es aquel en el cual el sistema se encuentra en un solo estado cuántico. Un estado mixto es aquel en el cual el sistema se encuentra en una superposición de estados cuánticos. El entrelazamiento de un sistema cuántico bipartito es una medida de la correlación entre los dos subsistemas. El entrelazamiento de un estado puro puede cuantificarse utilizando los coeficientes de Schmidt. El entrelazamiento de un estado mixto puede cuantificarse utilizando la concurrencia. Los sistemas cuánticos bipartitos son componentes fundamentales del procesamiento de información cuántica.

Para describir la interacción entre dos o más sistemas cuánticos, cada uno en su propio espacio de Hilbert, se los puede representar colectivamente como un único sistema cuántico dentro de un espacio de Hilbert unificado. La noción de un sistema cuántico compuesto se encuentra en los fundamentos de la teoría de los sistemas cuánticos abiertos. De hecho, un sistema abierto y su ambiente son dos partes de un sistema compuesto. Considerando dos sistemas físicos, A y B , asociados con los espacios de Hilbert \mathcal{H}_A y \mathcal{H}_B , respectivamente, el espacio de Hilbert \mathcal{H}_{AB} del sistema bipartito compuesto por A y B , se define mediante el producto tensorial:

$$\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (11)$$

La dimensión del espacio resultante es $\dim(\mathcal{H}_{AB}) = \dim(\mathcal{H}_A) \dim(\mathcal{H}_B)$. Fijando dos bases ortonormales $|j\rangle_A$ de \mathcal{H}_A y $|k\rangle_B$ de \mathcal{H}_B , un elemento genérico $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ puede escribirse como

$$|\psi\rangle = \sum_{jk} c_{jk} |j\rangle_A \otimes |k\rangle_B = \sum_{jk} c_{jk} |jk\rangle, \quad (12)$$

por lo que el conjunto $|j\rangle_A \otimes |k\rangle_B$ es una base del espacio \mathcal{H}_{AB} .

Análogamente, dados dos operadores lineales T_A y T_B que actúan sobre \mathcal{H}_A y \mathcal{H}_B respectivamente, es posible definir su producto tensorial como

$$(T_A \otimes T_B)(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = T_A |\psi\rangle \otimes T_B |\phi\rangle. \quad (13)$$

La matriz de densidad general de un sistema bipartito de dos cúbits puede expresarse de manera más general. Si los estados de los cúbits son $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle$ para el primer cúbit, y $|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle$ para el segundo cúbit, entonces la matriz de densidad ρ se puede escribir como:

$$\rho = \sum_{i,j,k,l} C_{i,j,k,l} |\psi_i\rangle \langle \psi_j| \otimes |\phi_k\rangle \langle \phi_l|. \quad (14)$$

En la expresión anterior, $C_{i,j,k,l}$ son los coeficientes de la matriz de densidad, y la suma se realiza sobre todos los índices posibles. Esta expresión general representa cualquier matriz de densidad para un sistema bipartito de dos cúbits. Los coeficientes $C_{i,j,k,l}$ deben satisfacer la condición $\text{Tr}(\rho) = 1$. Además, la matriz de densidad debe ser hermitiana para reflejar las propiedades físicas del sistema.

II.4 Entrelazamiento

La palabra “entrelazamiento” es una traducción libre del término acuñado por Schrödinger en 1935 para describir este fenómeno particular de sistemas cuánticos compuestos. Este concepto tuvo un impacto revolucionario en la física de la época. Einstein, por su parte, rechazó este efecto, al que se refirió como una “misteriosa acción a distancia”, debido a su incompatibilidad con el principio del realismo local. El realismo local es un principio intuitivo que postula que los objetos físicos deben tener propiedades objetivas antes de ser observados y que están influenciados sólo por su entorno inmediato. Desde ese momento, este concepto ha generado diversas incertidumbres en relación con la interpretación de la mecánica cuántica, y su validez ha sido evaluada a través de diversas teorías y experimentos, especialmente a partir de los estudios realizados por Bell (1964). A pesar de los avances en la comprensión del entrelazamiento, sigue siendo un tema central desde una perspectiva filosófica en el ámbito de la mecánica cuántica, ya que es la propiedad que permite distinguir entre correlaciones clásicas y microscópicas.

II.4.1 Definiciones

Para establecer medidas de entrelazamiento se debe comenzar por establecer cuándo un estado se encuentra entrelazado. En esta sección se define matemáticamente el concepto de entrelazamiento en el caso de estar tratando con sistemas puros compuestos por dos partes, para después ampliarlo a sistemas bipartitos que sean una mezcla. La cuantificación del entrelazamiento comienza por definir matemáticamente los estados entrelazados. Esta sección introduce tal definición para sistemas puros de dos partes y luego extiende el concepto al caso de sistemas bipartitos mixtos.

Definición 1.

Un estado puro bipartito $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ se dice que se encuentra entrelazado sí y sólo sí:

$$\forall |\phi_A\rangle \in \mathcal{H}_A, \forall |\phi_B\rangle \in \mathcal{H}_B, \quad (15)$$

$$|\psi\rangle \neq |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle. \quad (16)$$

De lo contrario, el estado se denomina separable.

El estado de Bell, $|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|00\rangle + |11\rangle]$, es un ejemplo ilustrativo de un estado con entrelazamiento. Intentar factorizar este estado en el producto de dos estados separados, $|\phi\rangle_A$ y $|\chi\rangle_B$, resulta inviable, independientemente de las elecciones de estos.

Definición 2.

Un estado mezcla ρ se describe mediante una matriz densidad, que es un operador lineal positivo y traza uno en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . La descomposición de un estado mezcla en estados puros implica expresar ρ como una suma ponderada de proyectores en estados puros, esto se expresa como:

$$\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (17)$$

donde p_n son coeficientes no negativos que suman uno, y ψ_n son vectores de estado puro. En este caso, si ρ se puede escribir de esta manera, se dice que el estado es "separable" o "no entrelazado". Sin embargo, si no es posible encontrar una descomposición de esta forma, entonces el estado se considera entrelazado.

En consecuencia, un estado mezcla bipartito ρ_{AB} se dice separable si puede ser escrito como

$$\rho_{\text{sep}} = \sum_i p_i \rho_A^i \otimes \rho_B^i, \quad (18)$$

donde ρ_A^i y ρ_B^i son *ensembles* arbitrarios de estados de los subsistemas A y B , y p_i es una distribución de probabilidad.

II.4.2 Concurrencia

Debido a las aplicaciones potenciales del entrelazamiento, es de gran interés no únicamente contar con estados entrelazados sino también determinar el grado de correlación entre ellos. Sin embargo, al ser una propiedad abstracta la cuantificación del entrelazamiento es una tarea difícil. La concurrencia fue introducida originalmente como una cantidad auxiliar en el cálculo del entrelazamiento de formación de sistemas formados por dos subsistemas. Sin embargo, puede considerarse como una medida independiente del entrelazamiento (Wootters, 1998, 2001; Audretsch, 2007) que se basa en una transformación de espín y que es aplicable a estados con un número arbitrario de cúbits. Es fácil darse cuenta de que los dos estados de un cúbit pueden asociarse con un pseudo espín, por lo que puede emplearse la notación de espines para representar a los cúbits y las operaciones realizadas sobre éstos. Para un estado puro de un cúbit, se define la transformación

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sigma_y |\psi^*\rangle, \quad (19)$$

en donde $|\psi^*\rangle$ es el complejo conjugado de un estado puro $|\psi\rangle$ expresado en la base (\uparrow, \downarrow) y σ_y es la matriz de Pauli (9). Esta operación corresponde al operador de inversión temporal para una partícula con espín-1/2 (Sakurai, 1994). Para estudiar a un sistema formado por múltiples cúbits, dicha transformación debe aplicarse a cada uno de forma individual. De esta manera, la inversión del estado de dos cúbits está dada por

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sigma_y \otimes \sigma_y |\psi^*\rangle, \quad (20)$$

en donde $|\psi\rangle$ está escrito en la base estándar de dos espines-1/2, $(|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle)$. La concurrencia para un estado puro de dos cúbits se define a partir de la invariancia a la transformación,

$$\mathcal{C}(\psi) = |\langle\psi|\tilde{\psi}\rangle| \quad (21)$$

y toma valores desde 0 hasta 1 (Bell, 1964; Wootters, 1998, 2001; Audretsch, 2007), que respectivamente corresponden a estados separables y a estados con el máximo entrelazamiento.

La concurrencia $\mathcal{C}(\rho)$ asociada a una matriz densidad ρ , se define como,

$$\mathcal{C}(\rho) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (22)$$

donde λ_i ($i = 1, 2, 3, 4$) son las raíces cuadradas de los valores propios de $\rho \bar{\rho}$, en orden descendente. Aquí, $\bar{\rho}$ representa el resultado de aplicar una operación spin-flip a ρ :

$$\bar{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y). \quad (23)$$

Para calcular $\mathcal{C}(\rho)$ en nuestro 2-dímero, debemos reducir la dimensionalidad de ρ a una matriz de 4×4 . Esto último se logra eligiendo parámetros del sistema tales que las contribuciones del estado de vacío sean despreciables. Si este es el caso, nuestra matriz satisface $\sum_{i \neq 0} \rho_{ii} \simeq 1$.

A lo largo del trabajo de tesis utilizaremos la concurrencia como medida del grado de entrelazamiento en el arreglo de dos cúbits.

II.5 Sistemas cuánticos abiertos

Los sistemas cuánticos abiertos, a menudo llamados sistemas cuánticos en contacto con un entorno o baño cuántico, son sistemas cuánticos que no están completamente aislados, sino que interactúan y pueden intercambiar energía o información con su entorno circundante. Dichos sistemas son de gran interés en la investigación de la física cuántica y tienen aplicaciones en áreas como la simulación cuántica, la comunicación cuántica, la criptografía cuántica y la construcción de dispositivos cuánticos, como los cúbits en la computación cuántica. Los sistemas cuánticos abiertos (Breuer y Petruccione, 2002) están intrínsecamente interconectados con su entorno, y esta interacción transforma la dinámica unitaria característica en un proceso irreversible en el tiempo. Desde un punto de vista microscópico, la descripción de la evolución debe hacerse teniendo en cuenta los grados de libertad del entorno o baño. Desde dicha evolución unitaria, la evolución de la matriz densidad del sistema se obtiene luego de trazar o marginar la información del baño. Dicho procedimiento, conocido como aproximación de Born-Markov (Breuer y Petruccione, 2002), da lugar a una evolución para la matriz densidad que es lineal e irreversible en el tiempo. Desde un punto de vista matemático puede determinarse cuál es la evolución más general para la matriz densidad basándose solamente en las propiedades de la misma. Esto es, la evolución debe preservar su hermiticidad, la traza, y su positividad. La solución de este problema da lugar a la ecuación de Lindblad (Breuer y Petruccione, 2002):

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)] + \sum_i \left[L_i \rho(t) L_i^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ L_i^\dagger L_i, \rho(t) \right\} \right], \quad (24)$$

donde $\rho(t)$ es el operador de densidad del sistema reducido, $H(t)$ es el hamiltoniano de sitio (hamiltoniano del sistema) y L_i son los operadores de salto los cuales se pueden entender como los operadores que representan la interacción que se produce entre el baño y el sistema en cuestión. Se puede observar que teniendo sólo en cuenta el primer

término de la ecuación anterior se obtiene la ecuación de Liouville-von Neumann,

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]. \quad (25)$$

La ecuación anterior es la ecuación que determina la evolución temporal de un operador densidad correspondiente a un sistema cuántico cerrado. En el apéndice A se realiza la deducción matemática de la ecuación de Lindblad basada en el trabajo de Manzano (2020).

II.5.1 Modelos de puntos cuánticos acoplados

En esta sección, abordamos la solución de la ecuación de Lindblad aplicada a diversos sistemas cuánticos abiertos. Nuestro foco se centra en sistemas compuestos por dos o cuatro puntos cuánticos, todos acoplados a contactos eléctricos. La selección de estos sistemas no es arbitraria, más bien, como mostraremos más adelante, se basa en la posibilidad de mapear nuestro modelo de dos fermiones acoplados de espín- $\frac{1}{2}$ a una configuración lineal de cuatro puntos cuánticos, representando así dos dímeros interconectados. Adicionalmente, exploraremos modelos de doble punto cuántico que exhiben un único nivel de energía y aquellos con dos niveles energéticos por punto. El análisis de estos modelos es esencial para la discusión e interpretación de nuestros resultados.

El objetivo principal es resolver la ecuación de Lindblad (24) de forma analítica en el régimen estacionario *i.e.* $\dot{\rho}(t) = 0$. Con esto, pretendemos derivar expresiones analíticas tanto para la corriente electrónica como para las poblaciones del sistema.

Modelo de dos puntos cuánticos acoplados

Consideremos un sistema, compuesto por dos puntos cuántico como se ilustra en la figura 7, con energías de sitio ϵ_1 y ϵ_2 , y un tuneo dado por τ .

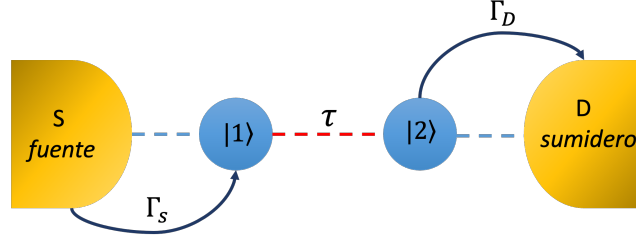


Figura 7: Modelo de dos puntos cuánticos en un sistema abierto acoplado a contactos eléctricos mediante una fuente (S) y un sumidero (D), con razones de tuneleo Γ_S y Γ_D , y un tuneleo entre los sitios $|1\rangle$ y $|2\rangle$ dado por τ .

El hamiltoniano del sistema está dado por,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 d_i^\dagger d_i \epsilon_i + \tau [d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1], \quad (26)$$

en donde d_i^\dagger y d_i son los operadores de creación y aniquilación en el i -ésimo sitio. El sistema está acoplado a los contactos con razones de tuneleo asociadas a la fuente (S) y sumidero (D), dadas por Γ_S y Γ_D , respectivamente. Alternativamente, el hamiltoniano (26) puede escribirse como,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 |i\rangle \langle i| \epsilon_i + \tau [|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|]. \quad (27)$$

Utilizamos la ecuación de Lindblad (24) para calcular la matriz de densidad ρ ,

$$\dot{\rho} = \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, \rho] + \sum_{\alpha} (L_{\alpha} \rho L_{\alpha}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{L_{\alpha}^{\dagger} L_{\alpha}, \rho\}), \quad (28)$$

donde L_{α} son los operadores de salto con $\alpha = S, D$. Por lo que podemos escribir la ecuación (28) como:

$$\dot{\rho} = \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, \rho] + L_S \rho L_S^{\dagger} - \frac{1}{2} \{L_S^{\dagger} L_S, \rho\} + L_D \rho L_D^{\dagger} - \frac{1}{2} \{L_D^{\dagger} L_D, \rho\}, \quad (29)$$

donde $\{\dots, \dots\}$ es el anticonmutador, y hemos definimos los siguientes operadores de salto, $L_S = \sqrt{\Gamma_S} d_1^\dagger d_0$ y $L_D = \sqrt{\Gamma_D} d_0^\dagger d_2$. Sustituyendo los operadores de salto en la

ecuación (29),

$$\dot{\rho} = \frac{-i}{\hbar}[\hat{H}, \rho] + \Gamma_S(\rho_{00} |1\rangle \langle 1| - \frac{1}{2}\{|0\rangle \langle 0|, \rho\}) + \Gamma_D(\rho_{22} |0\rangle \langle 0| - \frac{1}{2}\{|2\rangle \langle 2|, \rho\}), \quad (30)$$

con elementos de matriz dados por,

$$\dot{\rho}_{ij} = \frac{-i}{\hbar} \langle i | [\hat{H}, \rho] | j \rangle + \Gamma_S(\rho_{00} \delta_{i1} \delta_{1j} - \frac{1}{2} \langle i | \{|0\rangle \langle 0|, \rho\} | j \rangle) + \Gamma_D(\rho_{22} \delta_{i0} \delta_{0j} - \frac{1}{2} \langle i | \{|2\rangle \langle 2|, \rho\} | j \rangle), \quad (31)$$

con $i, j = 0, 1, 2$. De esta manera obtenemos las ecuaciones maestras para un doble punto cuántico, dadas por:

$$\dot{\rho}_{00} = \Gamma_D \rho_{22} - \Gamma_S \rho_{00}, \quad (32)$$

$$\dot{\rho}_{01} = \frac{i}{\hbar}(\epsilon_1 \rho_{01} + \tau \rho_{02}) - \frac{\Gamma_S}{2} \rho_{01}, \quad (33)$$

$$\dot{\rho}_{02} = \frac{i}{\hbar}(\tau \rho_{01} + \epsilon_2 \rho_{02}) - \frac{\Gamma_S}{2} \rho_{02} - \frac{\Gamma_D}{2} \rho_{02}, \quad (34)$$

$$\dot{\rho}_{10} = \frac{-i}{\hbar}(\tau \rho_{20} + \epsilon_1 \rho_{10}) - \frac{\Gamma_S}{2} \rho_{10}, \quad (35)$$

$$\dot{\rho}_{11} = \frac{-i}{\hbar}(\tau \rho_{21} + \tau \rho_{12}) - \Gamma_S \rho_{00}, \quad (36)$$

$$\dot{\rho}_{12} = \frac{-i}{\hbar}(\epsilon_1 \rho_{12} + \tau \rho_{22} - \tau \rho_{11} - \epsilon_2 \rho_{12}) - \frac{\Gamma_D}{2} \rho_{12}, \quad (37)$$

$$\dot{\rho}_{20} = \frac{-i}{\hbar}(\tau \rho_{10} + \epsilon_2 \rho_{20}) - \frac{\Gamma_S}{2} \rho_{20} - \frac{\Gamma_D}{2} \rho_{20}, \quad (38)$$

$$\dot{\rho}_{21} = \frac{-i}{\hbar}(\tau \rho_{11} + \epsilon_2 \rho_{21} - \epsilon_1 \rho_{21} - \tau \rho_{22}) - \frac{\Gamma_D}{2} \rho_{21}, \quad (39)$$

$$\dot{\rho}_{22} = \frac{-i}{\hbar}(\tau \rho_{12} - \tau \rho_{21}) - \Gamma_D \rho_{22}. \quad (40)$$

Las ecuaciones anteriores forman un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas de primero orden, que pueden ser resueltas fácilmente con el uso de herramientas computacionales en el régimen estacionario. La corriente para un sistema de puntos cuánticos acoplados esta dada por,

$$I = e \Gamma_D \rho_{44}, \quad (41)$$

en donde e es la carga del electrón y en nuestros cálculos consideramos $e = \hbar = 1$. Por lo tanto la corriente promedio para el sistema de doble punto cuántico sustituyendo el

valor de ρ_{44} es,

$$I = \frac{4\tau^2\Gamma_D^2\Gamma_S}{4\tau^2\Gamma_D(\Gamma_D + 2\Gamma_S) + \Gamma_D\Gamma_S[\Gamma_D^2 + 4(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2]}. \quad (42)$$

Consideremos el caso particular en donde $\Gamma_D = \Gamma_S = \Gamma$ (caso simétrico),

$$I = \frac{4\tau^2\Gamma^2}{12\tau\Gamma + \Gamma^3 + 4\Gamma(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2}. \quad (43)$$

II.5.2 Sistema de cuatro puntos cuánticos acoplados

De la misma manera se puede obtener la matriz de densidad para un sistema de cuatro puntos cuánticos como se muestra en la figura 8,

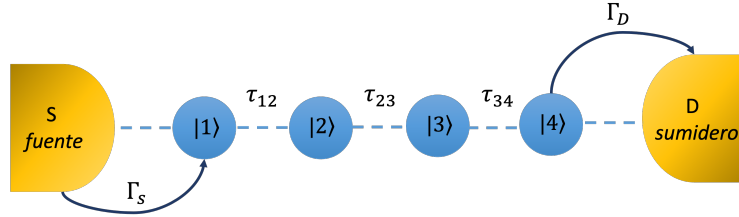


Figura 8: Modelo de cuatro puntos cuánticos en un sistema abierto acoplado a contactos eléctricos mediante una fuente (S) y un sumidero (D), con razones de tuneo Γ_S y Γ_D y tuneos entre los sitios dados por τ_{12} , τ_{23} y τ_{34} .

El hamiltoniano del sistema está dado por,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^4 |i\rangle \langle i| \epsilon_i + \tau_{12} [|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|] + \tau_{23} [|2\rangle \langle 3| + |3\rangle \langle 2|] + \tau_{34} [|3\rangle \langle 4| + |4\rangle \langle 3|]. \quad (44)$$

Utilizamos de nuevo la ecuación (24), con los siguientes operadores de salto: $L_S = \sqrt{\Gamma_S} |1\rangle \langle 0|$ y $L_D = \sqrt{\Gamma_D} |0\rangle \langle 4|$. Utilizando (24) obtenemos la ecuación de Lindblad,

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho] + \Gamma_S (\rho_{00} |1\rangle \langle 1| - \frac{1}{2} \{|0\rangle \langle 0|, \rho\}) + \Gamma_D (\rho_{44} |0\rangle \langle 0| - \frac{1}{2} \{|4\rangle \langle 4|, \rho\}), \quad (45)$$

donde sus elementos de matriz están dados por

$$\dot{\rho}_{ij} = \frac{-i}{\hbar} \langle i| [\hat{H}, \rho] |j\rangle + \Gamma_S (\rho_{00} \delta_{i1} \delta_{1j} - \frac{1}{2} \langle i| \{|0\rangle \langle 0|, \rho\} |j\rangle) + \Gamma_D (\rho_{44} \delta_{i0} \delta_{0j} - \frac{1}{2} \langle i| \{|4\rangle \langle 4|, \rho\} |j\rangle). \quad (46)$$

Del mismo modo, las ecuaciones maestras se pueden derivar utilizando herramientas computacionales, lo que permite obtener una expresión analítica para la corriente electrónica.

II.5.3 Sistema de dos puntos cuánticos acoplados con dos niveles cada uno

A continuación consideremos un sistema de dos puntos cuánticos con dos niveles cada uno. Estos niveles representan estados de espín arriba (abajo) y se caracterizan por dos fuentes y dos sumideros, como se ilustra en la figura 9.

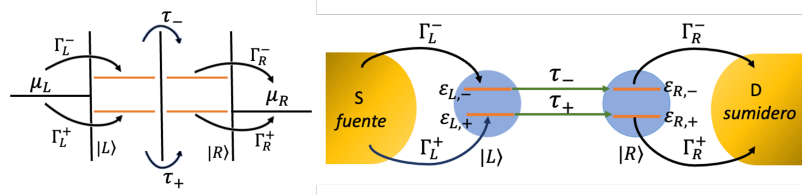


Figura 9: Modelo de dos puntos cuánticos con dos niveles cada uno acoplados a contactos eléctricos mediante fuentes (S) y un sumideros (D), con razones de tunelamiento $\Gamma_L^{-,+}$ y $\Gamma_R^{-,+}$ y tuneleos entre los puntos dados por τ_- y τ_+ .

El sistema anterior está descrito por el siguiente hamiltoniano,

$$\begin{aligned}
 H = & \varepsilon_{L,+} |L, +\rangle \langle L, +| + \varepsilon_{L,-} |L, -\rangle \langle L, -| \\
 & \varepsilon_{R,+} |R, +\rangle \langle R, +| + \varepsilon_{R,-} |R, -\rangle \langle R, -| \\
 & + T_+ [|L, +\rangle \langle R, +| + |R, +\rangle \langle L, +|] \\
 & + T_- [|L, -\rangle \langle R, -| + |R, -\rangle \langle L, -|].
 \end{aligned} \tag{47}$$

El formalismo para resolver este sistema es el de la matriz de densidad reducida, por lo que se resolverá de la misma manera que los sistemas anteriormente mencionados. La base utilizada en este caso es la base compuesta de los puntos cuánticos y

el espín $\{|0\rangle, |L, +\rangle, |L, -\rangle, |R, +\rangle, |R, -\rangle\}$. La corriente electrónica para este sistema esta dada por,

$$I = e\Gamma[\rho_{RR}^{++} + \rho_{RR}^{--}], \quad (48)$$

donde ahora se tienen dos salidas de corriente como se muestra en la figura 9. Finalmente la corriente obtenida para el doble punto cuántico con dos niveles es,

$$I_{dd} = \frac{4\Gamma\tau^2}{\Gamma^2 + 10\tau^2}. \quad (49)$$

Capítulo III

Modelo de dos dímeros acoplados

En este capítulo se presenta una descripción del modelo utilizado, el cual consiste en un arreglo de dos dímeros acoplados que exhibe las propiedades de un sistema tipo Su-Schrieffer-Heeger (Su *et al.*, 1979) (SSH, por sus siglas en inglés), el cual es utilizado para describir las propiedades de las bandas de energía en una cadena de dímeros caracterizado por tuneleos intra e intercelda (János K. Asbóth y Pályi, 2016). Una de nuestras aportaciones es que hemos adecuado dicho modelo tipo SSH a un sistema abierto que permite el acoplamiento a contactos (fuente y sumidero), esto con el propósito de explorar propiedades de transporte electrónico en el sistema. En este contexto de transporte de carga, nuestro modelo puede ser considerado como una configuración lineal de cuatro puntos cuánticos con tuneleos entre estos y acoplamiento a los contactos.

Este sistema está inspirado en un hamiltoniano XY (Yi *et al.*, 2004) para dos fermiones de espín- $\frac{1}{2}$ con acoplamiento J en presencia de un campo magnético B aplicado a uno de los cúbits. Hemos demostrado que mediante una transformación de similitud, dicho modelo puede ser mapeado al de dos dímeros acoplados en donde los tunelajes intracelda e intercelda así como la energías de sitio, estarán ahora relacionados con los parámetros de la magnitud y dirección de campo magnético, así como del acoplamiento de espín. A continuación se presentan los detalles del sistema que estudiaremos en esta tesis.

El modelo de dos dímeros acoplados que estudiaremos es equivalente al de un arreglo de cuatro puntos cuánticos, cuyo hamiltoniano posee la siguiente representación

matricial en la base compuesta $\{|-\rangle, |+\rangle, |-\rangle, |+\rangle\}$:

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}B \cos \theta & \frac{1}{2}B e^{i\phi} \sin \theta & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}B e^{-i\phi} \sin \theta & \frac{1}{2}B \cos \theta & J & 0 \\ 0 & J & -\frac{1}{2}B \cos \theta & \frac{1}{2}B e^{i\phi} \sin \theta \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}B e^{-i\phi} \sin \theta & \frac{1}{2}B \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (50)$$

en donde $\pm B \cos \theta/2$ juega el papel de las energías de sitio, $B e^{\pm i\phi} \sin \theta/2$ los tuneleos intracelda y J el tuneleo intercelda, como se observa en la figura 10.

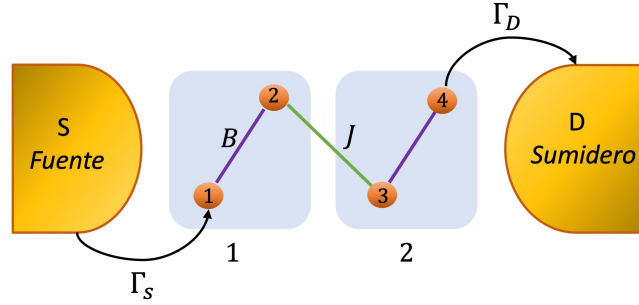


Figura 10: Modelo de dos dímeros en donde los puntos cuánticos están representados por los círculos en color naranja. Los tuneleos intracelda e intercelda están dados por B y J , respectivamente y las celdas unitarias están indexadas por $N = 1, 2$. El sistema es abierto y está acoplado a contactos eléctricos mediante una fuente y un sumidero, con razones de transición Γ_S y Γ_D constantes.

Es por esto que de ahora en adelante nos referiremos a los parámetros J y B como tuneleos, donde J es el tuneleo entre el dímero 1 y 2. La representación matricial (50) en la que se basa nuestro modelo de *dos dímeros acoplados* caracterizados por diversos tipos de acoplamientos, posee la estructura de un modelo SSH modificado, conocido como Rice-Mele (János K. Asbóth y Pályi, 2016). El modelo de SSH permite describir fermiones sin espín en una cadena de dímeros que forman una red compuesta de dos sitios (átomos), en donde los electrones tienen la posibilidad de propagarse entre

los dímeros con amplitudes de tuneleo escalonadas. Dicho modelo ha resultado de gran utilidad para el estudio de las propiedades topológicas de los materiales (János K. Asbóth y Pályi, 2016). En nuestro caso el modelo equivalente está descrito por el hamiltoniano de sitio $\hat{H}_{2d} = \hat{H}_u + \hat{H}_v + \hat{H}_w$, en donde hemos definido

$$\begin{aligned}
\hat{H}_u &= u \sum_{m=1}^N \left[d_{2m}^\dagger d_{2m} \right] - u \sum_{m=1}^N \left[d_{2m-1}^\dagger d_{2m-1} \right]; \\
\hat{H}_v &= v \sum_{m=1}^N \left[d_{2m}^\dagger d_{2m-1} \right] + h.c.; \\
\hat{H}_w &= w \sum_{m=1}^{N-1} \left[d_{2m+1}^\dagger d_{2m} + h.c. \right],
\end{aligned} \tag{51}$$

en donde podemos establecer la siguiente correspondencia con los tuneleos intracelda dados por $v = \frac{1}{2}B \text{sen} \theta e^{-i\phi}$, el acoplamiento intercelda $w = J$, y las energías de sitio dadas por $u = \frac{1}{2}B \text{cos} \theta$, como se muestra en la figura 11. Los operadores fermiónicos de creación y de aniquilación para el i -ésimo punto cuántico en la base $\{|i\rangle\}$ están dados por d_i^\dagger y d_i , respectivamente y $h.c.$ denota a los términos transpuestos conjugados en el hamiltoniano.

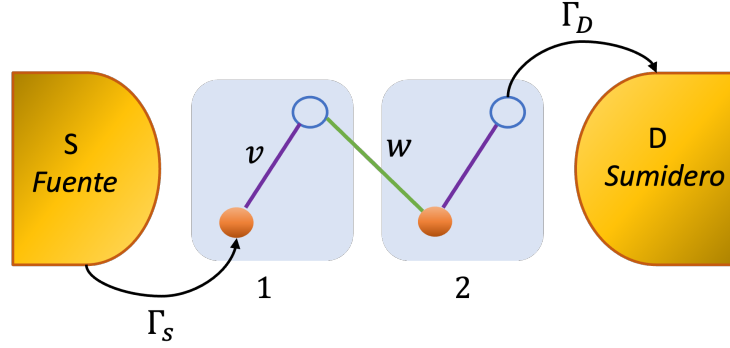


Figura 11: Modelo de dos dímeros en donde los dos sitios por celda corresponden a los átomos A y B representados por círculos en color naranja y azul, respectivamente. Los tuneleos intracelda e intercelda están dados por v y w , respectivamente y las celdas unitarias están indexadas por $N = 1, 2$. El sistema es abierto y está acoplado a contactos eléctricos mediante una fuente y un sumidero, con razones de transición Γ_S y Γ_D constantes.

El sistema anterior también es equivalente al de dos *cúbits* (Nielsen y Chuang, 2011) acoplados, por lo que resultará de interés medir las *correlaciones cuánticas*, *i.e.*, la manifestación del grado de no-clasicidad de un sistema. Para esto exploramos uno de los diferentes indicadores para medir el grado de entrelazamiento como la *conurrencia* (Wootters, 1998).

Nuestro modelo está inspirado en un hamiltoniano XY , tal como fue introducido por Yi *et al.* (2004). Este se representa mediante el siguiente hamiltoniano para dos fermiones de espín- $\frac{1}{2}$ con acoplamiento J :

$$H_0 = \frac{1}{2}\alpha \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{B}(t) + J (\sigma_1^+ \sigma_2^+ + \sigma_2^- \sigma_1^-), \quad (52)$$

con $\boldsymbol{\sigma}_j = (\sigma_j^x, \sigma_j^y, \sigma_j^z)$, y los operadores de ascenso y descenso $\sigma_j^\pm = (\sigma_j^x \pm i\sigma_j^y)/2$, en donde $j = 1, 2$ representa el índice de la partícula. Además, el sistema está bajo los efectos de un campo magnético aplicado al fermión 1, dado por $\mathbf{B}(t) = B \hat{\mathbf{n}}(t)$, con

$\hat{\mathbf{n}}(t) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$, en donde suponemos que la dependencia temporal se encuentra en el parámetro $\phi = \phi(t)$, con $\phi \in [0, 2\pi]$, y $\theta \in [0, \pi]$. El hamiltoniano de Yi *et al.* (2004) es representado originalmente en la base $\{|+-\rangle, |++\rangle, |--\rangle, |+-\rangle\}$ mediante la siguiente matriz (en unidades de $\alpha = 1$):

$$H_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}B \cos \theta & 0 & \frac{1}{2}B e^{-i\phi} \sin \theta & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}B \cos \theta & J & \frac{1}{2}B e^{-i\phi} \sin \theta \\ \frac{1}{2}B e^{i\phi} \sin \theta & J & -\frac{1}{2}B \cos \theta & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}B e^{i\phi} \sin \theta & 0 & -\frac{1}{2}B \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (53)$$

Nuestro hamiltoniano (50) puede obtenerse mediante la transformación de similaridad $H = U^\dagger H_0 U$, mediante la transformación unitaria:

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (54)$$

cuyo efecto es rotar al hamiltoniano (53) a la base de espín $\{|+-\rangle, |++\rangle, |--\rangle, |+-\rangle\}$.

Utilizando el hamiltoniano definido en (50), es posible resolver analíticamente la ecuación de Lindblad (29) en el régimen estacionario, esto es, $\dot{\rho}(t) = 0$. Para esto debemos representar al hamiltoniano en la siguiente base que incluya al estado del vacío $|00\rangle$ *i.e.* $\{|00\rangle, |+-\rangle, |++\rangle, |--\rangle, |+-\rangle\} \equiv \{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$, por lo que el hamiltoniano del sistema se representa como

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\alpha B \cos \theta & \frac{1}{2}\alpha B e^{i\phi} \sin \theta & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\alpha B e^{-i\phi} \sin \theta & \frac{1}{2}\alpha B \cos \theta & J & 0 \\ 0 & 0 & J & -\frac{1}{2}\alpha B \cos \theta & \frac{1}{2}\alpha B e^{i\phi} \sin \theta \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\alpha B e^{-i\phi} \sin \theta & \frac{1}{2}\alpha B \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (55)$$

Siguiendo el procedimiento descrito en la sección II.5, se puede calcular la corriente electrónica I mediante la ecuación (41) así como las poblaciones del sistema. Las expresiones analíticas de estas cantidades se presentarán en la sección de los resultados.

III.1 Parametrización

Una manera de analizar el sistema de manera más general es realizando una parametrización. Esto permite explorar el comportamiento del sistema de una manera más efectiva, puesto que se reduce el número de parámetros en la solución del sistema. Este reescalamiento se aplica sobre la ecuación de Lindblad y el hamiltoniano (55) y consiste en dividir dichas ecuaciones por el factor $2/\alpha B$, lo cual conduce al hamiltoniano dado por,

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} -\cos \theta & e^{i\phi} \sin \theta & 0 & 0 \\ e^{-i\phi} \sin \theta & \cos \theta & g & 0 \\ 0 & g & -\cos \theta & e^{i\phi} \sin \theta \\ 0 & 0 & e^{-i\phi} \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (56)$$

en donde hemos definido $g = 2J/\alpha B$ que representa el tuneleo intercelda. Resolviendo la ecuación maestra y utilizando la ecuación (41) se deriva la corriente electrónica promedio. Sin embargo, como consecuencia de la parametrización, dicha corriente será diferente a la obtenida en el sistema no parametrizado. Esta nueva corriente \tilde{I} guarda una relación con la corriente original, I , mediante la expresión $\tilde{I} = I/(B/2)$. La parametrización no sólo simplifica el hamiltoniano, sino que también proporciona una vía para comprender cómo las modificaciones en este se manifiestan en cambios en la corriente, lo cual resulta fundamental en el estudio y control de sistemas cuánticos que se presenta en el capítulo IV.

Capítulo IV

Resultados

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en el estudio de un sistema abierto conformado por dos dímeros acoplados conectado a una fuente y a un sumidero de electrones, que se discute en el capítulo III. Mediante la solución de la ecuación de Lindblad en el régimen estacionario se obtienen expresiones analíticas para la corriente promedio I y las poblaciones ρ_{ii} ($i = 0, 1, 2, 3, 4$) como funciones de los parámetros que caracterizan al sistema, como los son el acoplamiento J , la magnitud B y dirección θ del campo magnético, así como de las razones de tunelamiento a los contactos a la izquierda y derecha del sistema, dadas por Γ_S y Γ_D , respectivamente. También se explora el grado de entrelazamiento del sistema mediante el estudio numérico de la concurrencia para las cantidades de interés antes mencionadas. En la sección IV.1 se realiza un análisis de la corriente como función de B para distintos valores de J/Γ . De igual manera, se estudia el comportamiento de I como función de J , para distintos valores de B/Γ . Adelantamos que las razones de los parámetros J y B normalizados juegan un papel importante en el comportamiento de la corriente electrónica, ya que mediante estos es posible identificar los regímenes en donde la I exhibe comportamientos distintos. Para tener un panorama completo del comportamiento del sistema, en la sección IV.2 realizamos un estudio de las poblaciones ρ_{ii} como función de B , en los regímenes caracterizados por J/Γ . Esto es, exploramos los casos en los cuales la relación $J/\Gamma \leq 1$ y $J/\Gamma > 1$. Observamos que, en estas condiciones, las poblaciones manifiestan un comportamiento peculiar, lo que nos permite identificar una reconfiguración en la dinámica del sistema. En la sección IV.3 estudiamos el grado de entrelazamiento en el sistema mediante el cálculo numérico

de la concurrencia, y su relación con la corriente en el sistema. Finalmente, en la sección IV.4 realizamos un estudio tanto de la corriente y la concurrencia efectuando un reescalamiento en el hamiltoniano y en la ecuación de Lindblad correspondiente, esto con el propósito de obtener propiedades más generales del sistema.

IV.1 Corriente en un cuádruple punto cuántico

El modelo de dos dímeros acoplados que estudiaremos a continuación es equivalente al de un sistema que consiste en un arreglo de cuatro puntos cuánticos, como lo hemos discutido en el capítulo III y su representación en la base de sitios $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$ está dada por el hamiltoniano (55). Mediante este último resolvemos analíticamente la ecuación de Lindblad (29) en el régimen estacionario *i.e.* $\dot{\rho}(t) = 0$, siguiendo el procedimiento descrito en la sección II.5. Lo anterior se reduce a resolver un sistema de ecuaciones algebraicas para los elementos de matriz ρ_{ij} obtenidas de la ecuación de Lindblad, en donde una de las ecuaciones puede ser sustituida por la condición $\sum_i \rho_{ii} = 1$, y obtener así expresiones analíticas exactas para cada una de estas cantidades. Lo anterior permite obtener la corriente electrónica I mediante la ecuación (41), lo cual nos lleva a:

$$I = \frac{2B^4 J^2 \Gamma_D \Gamma_S \sin^4 \theta}{8\Gamma_D^2 J^4 \Gamma_S + 32B^2 J^4 \Gamma_S \cos^2 \theta + B^4 [(\Gamma_D^2 \Gamma_S + 2J^2(\Gamma_D + 4\Gamma_S)) \sin^4 \theta + 4J^2 \Gamma_S \sin^2 2\theta]}, \quad (57)$$

en donde hemos elegido unidades de $\hbar = e = 1$. A manera de simplificación consideramos el caso simétrico, en donde $\Gamma_D = \Gamma_S = \Gamma$, por lo que la expresión anterior se reduce a

$$I = \frac{2B^4 \Gamma^2 J^2 \sin^4 \theta}{8\Gamma^3 J^4 + 32B^2 \Gamma J^4 \cos^2(\theta) + B^4 [(\Gamma^3 + 10\Gamma J^2) \sin^4 \theta + 4\Gamma J^2 \sin^2(2\theta)]}. \quad (58)$$

Evaluando la ecuación anterior en la dirección $\theta = \pi/2$, y normalizando I a unidades del parámetro Γ , esto es, $I' = I/\Gamma$ obtenemos

$$I' = \frac{2B^4\Gamma J^2}{8\Gamma^2 J^4 + B^4(\Gamma^2 + 10J^2)}. \quad (59)$$

A continuación realizaremos un estudio de la corriente electrónica como función de los distintos parámetros B , Γ y J . En la figura 12 se ilustra cómo la corriente electrónica varía como función de B para diferentes valores de J , manteniendo Γ constante. Se observa que la corriente, I' , aumenta monótonamente hacia un valor asintótico dependiente de J . Es decir, no se aprecia un pico pronunciado en la corriente a medida que la intensidad del campo incrementa. No obstante, para valores grandes de J , la corriente manifiesta un comportamiento interesante, convergiendo hacia un valor asintótico común.

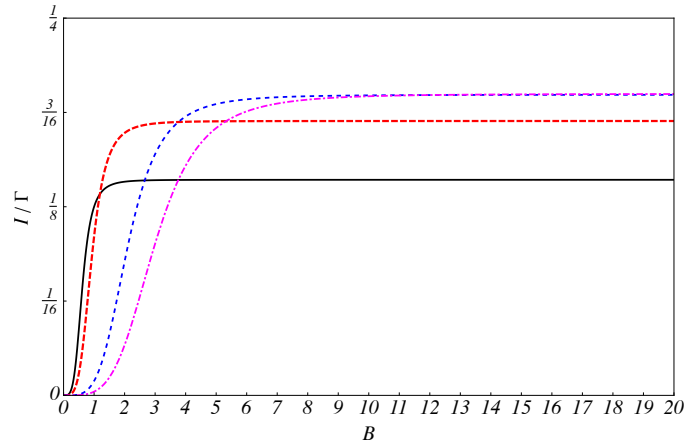


Figura 12: Corriente electrónica I' como función del tuneo B para un valor fijo de $\Gamma = 1$ y distintos valores del acoplamiento: $J = 0.5$ (línea negra continua), $J = 1$ (línea roja a trazos), $J = 5$ (línea azul a trazos) y $J = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).

En las figuras 13 y 14, analizamos la variación de la corriente como función de B , empleando los mismos valores de acoplamiento J que en la figura 10, pero con distintos valores del parámetro de acoplamiento Γ . Se observa que el comportamiento general

en las figuras 13 y 14 es similar al de la figura 12. Sin embargo, es importante destacar que los valores asintóticos de la corriente difieren entre sí en estos casos. Además, como se observa en la figura 10, el cociente J/Γ , que estamos variando, oscila entre 0.1 y 10. Se nota que el valor máximo de este cociente disminuye en las figuras 11 y 12. Esto sugiere que la relación mencionada podría ser clave para establecer un criterio que nos permita obtener gráficas de corriente con valores asintóticos consistentes. Esto es, a mayor valor del cociente mayor es la coincidencia entre los valores límites de las curvas. Esto se verifica en la figura 13, en donde consideramos valores de la corriente para distintos valores de J , tales que $J/\Gamma \gg 1$.

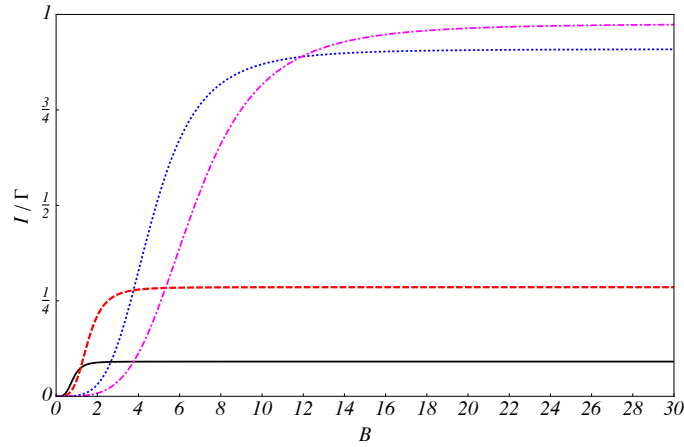


Figura 13: Corriente electrónica I' como función del tuneleo B con un valor de $\Gamma = 5$. $J = 0.5$ (línea negra continua), $J = 1$ (línea roja a trazos), $J = 5$ (línea azul a trazos) y $J = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).

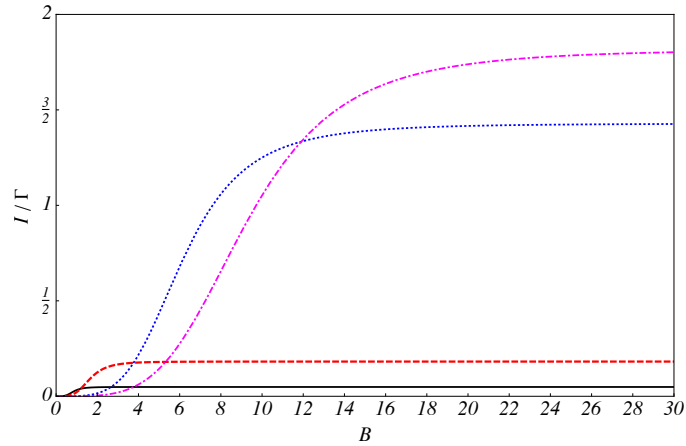


Figura 14: Corriente electrónica I' como función del tuneo B con un valor de $\Gamma = 10$. $J = 0.5$ (línea negra continua), $J = 1$ (línea roja a trazos), $J = 5$ (línea azul a trazos) y $J = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).

Se muestra que, para reproducir el comportamiento observado en la figura 12, es necesario incrementar el valor del parámetro J , asegurándose de que este siempre sea mayor que Γ . Esta observación indica la existencia de una relación entre estos parámetros, detalle que se ilustra en la figura 15. En esta última se observa que para valores grandes de B y J , la corriente I' tiende a un valor constante dado por 0.20.

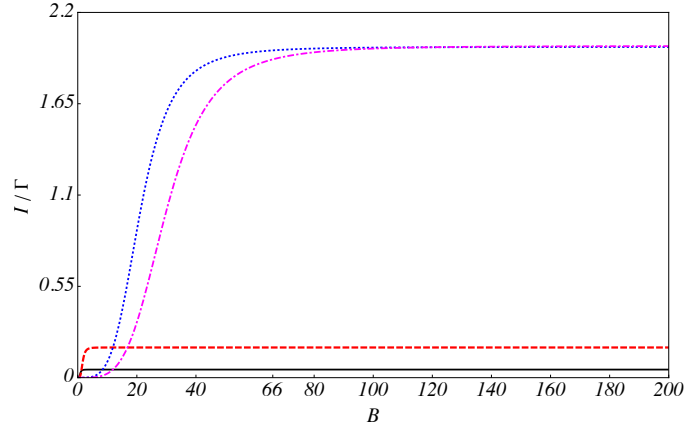


Figura 15: Corriente electrónica I' como función del tuneleo B con un valor de $\Gamma = 10$. $J = 0.5$ (línea negra continua), $J = 1$ (línea roja a trazos), $J = 50$ (línea azul a trazos) y $J = 100$ (línea magenta a trazos y puntos).

Los resultados obtenidos anteriormente indican que la razón J/Γ es un parámetro importante en el régimen asintótico. Es por esto que a continuación realizamos un análisis asintótico de la ecuación (59). El procedimiento consiste en tomar el límite cuando $B \rightarrow \infty$ y realizar algunas manipulaciones algebraicas. Se observa que efectivamente la corriente puede parametrizarse en términos de la razón J/Γ como se muestra a continuación:

$$I' = \frac{2J(J/\Gamma)}{1 + 10(J/\Gamma)^2}. \quad (60)$$

Al tomar el límite $J/\Gamma \rightarrow \infty$ se observa que la corriente tiende a un valor que dependerá sólo del valor de Γ ,

$$I' = \frac{\Gamma}{5}, \quad (61)$$

lo que concuerda con las observaciones realizadas en la figura 15.

A continuación analizamos la variación del parámetro de acoplamiento J y su efecto en la corriente electrónica. Se observa un comportamiento distinto al mostrado en las figuras anteriores. Este nuevo comportamiento se muestra en la figura 16, en donde se

distingue la aparición de un pico pronunciado en la intensidad de corriente para valores pequeños del parámetro B . Se observa que, a medida que los valores de B aumentan, ocurre un cambio apreciable en el comportamiento de la corriente, en donde el pico de ésta desaparece gradualmente y tiende a estabilizarse en un valor constante.

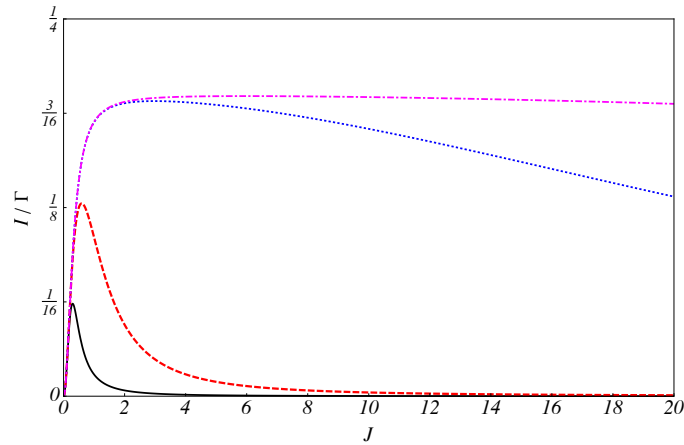


Figura 16: Corriente electrónica I' como función del tuneo J para el caso $\Gamma = 1$, para diferentes valores del campo magnético: $B = 0.5$ (línea negra continua), $B = 1$ (línea roja a trazos), $B = 5$ (línea azul a trazos) y $B = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).

A continuación procedemos a investigar los efectos sobre la corriente debidos al aumento de Γ , manteniendo constante los valores previamente asignados a B . Los resultados derivados de esta manipulación son presentados en las figuras 17 y 18. Se observa que con un incremento de Γ , se logra restablecer el pico máximo en la intensidad de la corriente que se había identificado con anterioridad. Por lo tanto, es evidente que el comportamiento asintótico que se había observado en la figura 14 no se manifiesta bajo estas circunstancias. Este hallazgo resalta que la variación en Γ tiene un efecto importante en el sistema, influenciando la dinámica de la corriente. La consecuente recuperación del pico máximo de corriente, anteriormente ausente, refleja la complejidad y la sensibilidad del sistema a cambios en los parámetros.

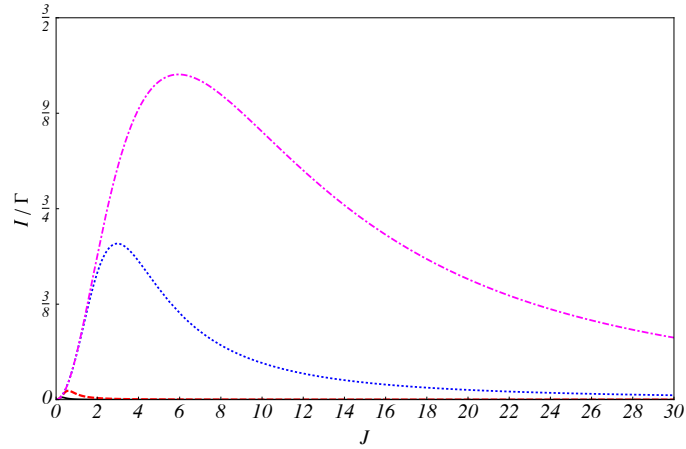


Figura 17: Corriente electrónica I' como función del tuneleo J para un valor fijo $\Gamma = 5$, y los siguientes valores: $B = 0.5$ (línea negra continua), $B = 1$ (línea roja a trazos), $B = 5$ (línea azul a trazos) y $B = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).

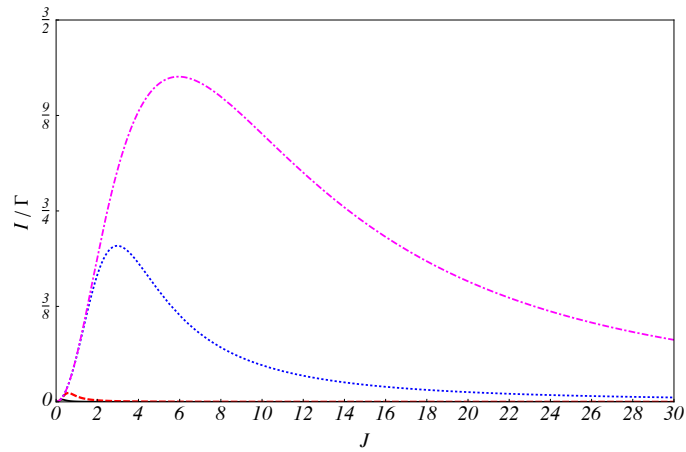


Figura 18: Corriente electrónica I' como función del tuneleo J para un valor fijo de $\Gamma = 10$, y los siguientes valores: $B = 0.5$ (línea negra continua), $B = 1$ (línea roja a trazos), $B = 5$ (línea azul a trazos) y $B = 10$ (línea magenta a trazos y puntos).

El análisis previo resalta la importancia del parámetro Γ en la obtención de un valor máximo bien definido de corriente electrónica. Para lograr este máximo, se debe asegurar que el valor de Γ sea mayor que el valor de B . Esta relación es evidente en

la figura 19, donde queda claramente representado que cuando Γ es menor que B , el comportamiento tiende hacia un valor constante de I' , que se estabiliza en $I' = 2.0$.

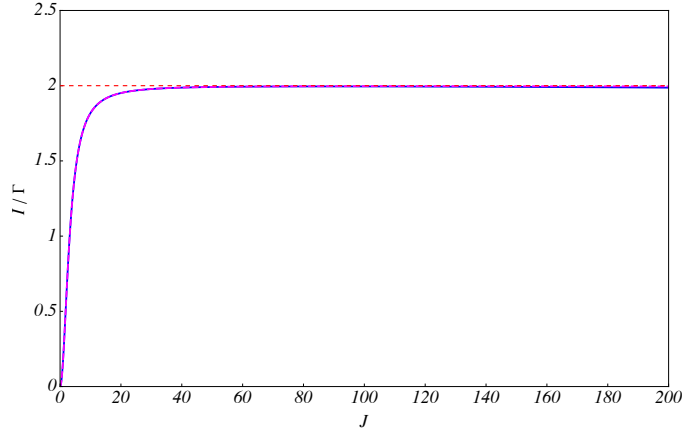


Figura 19: Corriente electrónica I' como función del tuneo J para $\Gamma = 10$ y los siguientes valores: $B = 150$ (línea azul a puntos) y $B = 200$ (línea magenta continua). La línea roja a trazos corresponde al valor asintótico de la corriente electrónica $I' = 2.0$.

Utilizando la ecuación (59) se obtiene una expresión analítica para el máximo de corriente electrónica, dado por

$$J_{max} = \frac{B}{2^{3/4}}, \quad (62)$$

$$I'_{max} = \frac{1}{\frac{2\sqrt{2}\Gamma}{B^2} + \frac{5}{\Gamma}}. \quad (63)$$

Cuando aplicamos el límite en la ecuación (63) con respecto a B , es decir, cuando hacemos $B \rightarrow \infty$, observamos que la corriente tiende a un valor constante. Este valor constante representa un punto de estabilidad en el comportamiento del sistema y se puede expresar como,

$$I'_{max, B \rightarrow \infty} = \frac{\Gamma}{5}, \quad (64)$$

mostrando así que la corriente está gobernada únicamente por Γ . Esto sugiere que, dentro del contexto del sistema que estamos analizando, otros parámetros o variables no tienen un impacto significativo en la corriente.

La figura 20 realizamos mapas de densidad de la corriente en función de B y J , que presentan una visión más general del efecto de Γ en la corriente, destacando una correlación directa entre ambos. Esto se evidencia en la ecuación (64), que demuestra la proporcionalidad directa de la corriente con respecto a Γ . Este descubrimiento se alinea con los resultados ilustrados en figuras anteriores, donde se muestra que el valor límite al que converge la corriente varía en función de Γ . Este hallazgo sugiere que el control del parámetro Γ podría ser una estrategia eficaz para modular la corriente electrónica en sistemas específicos. Estos resultados ofrecen nuevas perspectivas para la manipulación y el diseño de dispositivos en futuras investigaciones en el campo de la nanoelectrónica y la nanotecnología.

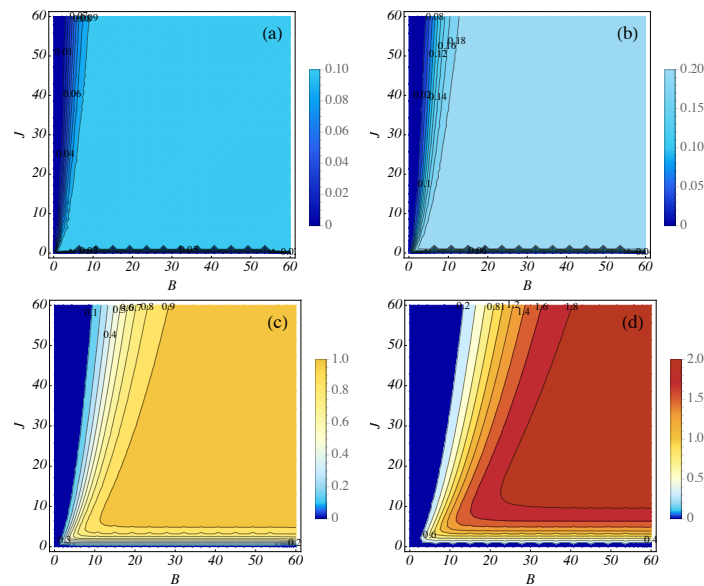


Figura 20: Mapa de densidad para la corriente electrónica con diferentes valores de Γ : (a) $\Gamma = 0.5$, (b) $\Gamma = 1$, (c) $\Gamma = 5$ y (d) $\Gamma = 10$. Se puede apreciar en los casos (a)-(d) cómo la corriente alcanza los valores asintóticos de $\Gamma/5$.

IV.2 Poblaciones

Para complementar nuestro análisis acerca de la corriente, realizamos un estudio de las poblaciones del sistema. En particular, centramos nuestra atención a la variación de las poblaciones con respecto a B , para explorar en qué forma las poblaciones de los estados y su distribución energética afectan la corriente del sistema. Como se mencionó anteriormente, al resolver la ecuación de Lindblad también es posible obtener expresiones analíticas para las poblaciones ρ_{ii} ($i = 0, 1, 2, 3, 4$), las cuales están dadas por:

$$\rho_{44} = \frac{2B^4\Gamma J^2 \sin^4 \theta}{B^4 [(\Gamma^3 + 10\Gamma J^2) \sin^4 \theta + 4\Gamma J^2 \sin^2 2\theta] + 32B^2\Gamma J^4 \cos^2 \theta + 8\Gamma^3 J^4}; \quad (65)$$

$$\rho_{33} = \frac{2B^2\Gamma J^2 (4B^2 \cot^2 \theta + B^2 + \Gamma^2 \csc^2 \theta)}{B^4 (\Gamma^3 + 10\Gamma J^2) + 16B^2\Gamma J^2 \cot^2 \theta (B^2 + 2J^2 \csc^2 \theta) + 8\Gamma^3 J^4 \csc^4 \theta}; \quad (66)$$

$$\rho_{22} = \frac{B^4\Gamma (\Gamma^2 + 4J^2) \sin^4 \theta}{2B^4 [(\Gamma^3 + 10\Gamma J^2) \sin^4 \theta + 4\Gamma J^2 \sin^2 2\theta] + 64B^2\Gamma J^4 \cos^2 \theta + 16\Gamma^3 J^4}; \quad (67)$$

$$\rho_{11} = \frac{\Gamma (B^4 (\Gamma^2 + 16J^2 \cot^2 \theta + 4J^2) - 4B^2 J^2 \csc^2 \theta (\Gamma^2 - 16J^2 \cot^2 \theta) + 16\Gamma^2 J^4 \csc^4 \theta)}{2B^4 (\Gamma^3 + 10\Gamma J^2) + 32B^2\Gamma J^2 \cot^2 \theta (B^2 + 2J^2 \csc^2 \theta) + 16\Gamma^3 J^4 \csc^4 \theta}. \quad (68)$$

La figura (21) proporciona una representación gráfica de estas poblaciones como función de B , para diferentes valores Γ y J .

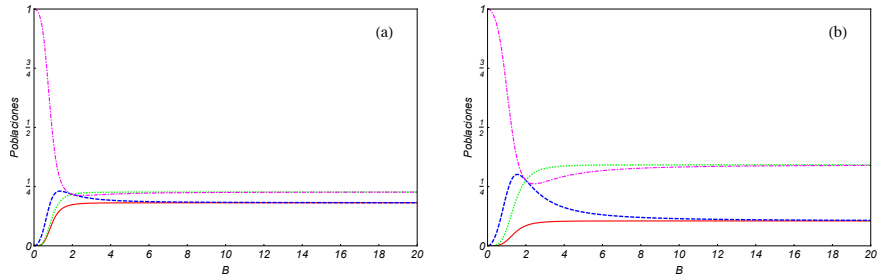


Figura 21: Poblaciones como función del campo magnético B , para un sistema de dos dímeros acoplados con $\theta = \pi/2$, así como (a) $\Gamma = 1$, $J = 1$, y (b) $\Gamma = 3$, $J = 1$. Las poblaciones correspondientes son: ρ_{44} (línea roja continua), ρ_{33} (línea azul a trazos), ρ_{11} (línea magenta a trazos) y ρ_{22} (línea verde a puntos).

Es importante destacar que a medida que el parámetro B aumenta, se observa un fenómeno interesante. En particular, las poblaciones ρ_{11} y ρ_{22} tienden a igualarse, al igual que las poblaciones ρ_{33} y ρ_{44} . Lo anterior se comprueba al tomar el límite $B \rightarrow \infty$ para el caso $\theta = \pi/2$ en las ecuaciones para las poblaciones, obteniendo así;

$$\rho_{44} = \rho_{33} = \frac{2\Gamma J^2}{\Gamma^3 + 10\Gamma J^2}, \quad (69)$$

$$\rho_{22} = \rho_{11} = \frac{\Gamma^3 + 4\Gamma J^2}{2\Gamma^3 + 20\Gamma J^2}, \quad (70)$$

donde se muestra que efectivamente las poblaciones se igualan por pares: $\rho_{44} = \rho_{33}$ y $\rho_{22} = \rho_{11}$. Cuando las poblaciones de los niveles de energía se igualan, generalmente significa que el sistema ha alcanzado un equilibrio en el que la probabilidad de encontrar el sistema en cualquiera de los estados es aproximadamente la misma. Este comportamiento sugiere una reconfiguración en el sistema: inicialmente, se trata de un sistema compuesto por cuatro puntos cuánticos acoplados, pero a medida que B aumenta, evoluciona hacia un sistema de dos puntos cuánticos de dos niveles acoplados. Esta transición en las poblaciones refleja una reorganización de los estados cuánticos del sistema a medida que se varía el parámetro B . Es un hallazgo significativo, ya que indica un cambio en la dinámica del sistema y puede tener implicaciones importantes para su comportamiento. La corroboración de lo mencionado anteriormente se puede llevar a cabo al tomar el límite $B \rightarrow \infty$ en la ecuación (59), lo que nos conduce a la siguiente ecuación.

$$I_{B \rightarrow \infty} = \frac{2\Gamma J^2}{\Gamma^2 + 10J^2} \quad (71)$$

Este resultado muestra que la ecuación anterior se comporta de manera funcional en su dependencia con Γ al igual que la corriente de un sistema de dos puntos cuánticos con dos niveles cada uno, con coeficientes de tuneo dados por $\tau = J$, como se muestra a continuación:

$$I_{dd} = \frac{4\Gamma\tau^2}{\Gamma^2 + 10\tau^2}. \quad (72)$$

En la figura 22 se muestra la corriente para cada sistema. En esta representación, es evidente un desfase notorio que se debe a una disparidad de un factor de 2 entre las ecuaciones (71) y (72). La razón de esta discrepancia radica en una característica fundamental que distingue a ambos sistemas: en el sistema de dos puntos cuánticos la corriente electrónica tiene dos salidas en ρ_{RR}^{++} y en ρ_{RR}^{--} (con $\rho_{RR}^{++} = \rho_{RR}^{--}$) lo que da lugar a dos corrientes polarizadas (con $I_{++} = I_{--}$), a diferencia del sistema de dos dímeros, donde la corriente tiene una sola salida en el punto ρ_{44} . Esto es, hemos demostrado analíticamente que $I_{B \rightarrow \infty} = I_{++} = I_{--}$.

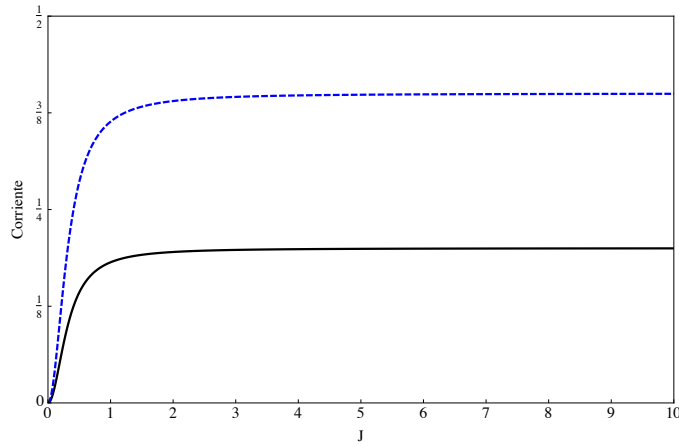


Figura 22: Corriente como función del tuneleo J con un valor de $\Gamma = 1$. La línea negra sólida corresponde a la corriente $I_{B \rightarrow \infty}$ y la línea azul a trazos a I_{dd} .

El comportamiento del sistema cambia significativamente conforme aumentamos el valor de J . A diferencia del caso anterior, donde las poblaciones se igualan por pares, en este nuevo análisis las poblaciones tienden a igualarse a medida que B aumenta, como se muestra en la figura 23. Si se toma el límite $J \rightarrow \infty$ de las ecuaciones (69) y (70) que todas las poblaciones tienden al mismo valor dado por $1/5$, lo cual coincide con el comportamiento de la corriente, tal como se describe en la ecuación (64) para una valor de $\Gamma = 1$. Esto sugiere que las poblaciones siguen un patrón similar al de la

corriente electrónica para estos valores específicos de J y Γ .

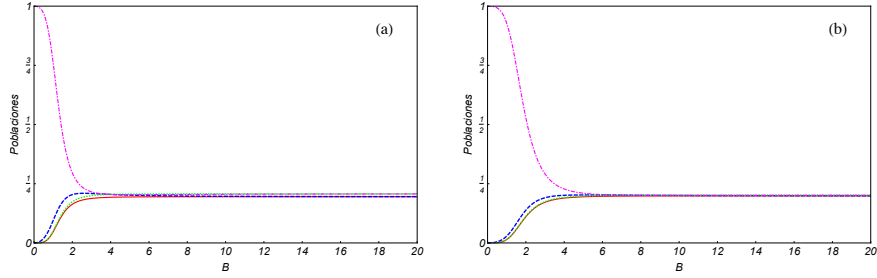


Figura 23: Poblaciones como función del campo magnético B , para un sistema de dos dímeros en la dirección $\theta = \pi/2$ con (a) $\Gamma = 1$, $J = 2$, y (b) $\Gamma = 1$, $J = 4$. Las poblaciones del sistema son: ρ_{44} (línea roja continua), ρ_{33} (línea azul a trazos), ρ_{11} (línea magenta a trazos) y ρ_{22} (línea verde a puntos).

Este cambio en el comportamiento puede ser atribuido a la influencia J , que controla la interacción entre los estados del sistema 1 y 2 (figura 10). En particular, todo indica que J está favoreciendo una distribución más uniforme de las poblaciones a medida que B aumenta. Recordando que J y B representan tuneleos entre los cúbits y los puntos cuánticos, al ser ambos parámetros grandes, las poblaciones se equilibran resultando en una distribución uniforme en todos los estados. Esta observación plantea la pregunta de si este nuevo sistema resultante es equivalente a uno nuevo, de manera similar a cómo el sistema anterior se evolucionó a un sistema de dos puntos cuánticos con dos niveles cada uno. Este aspecto amerita un análisis más detallado y se propone como línea de investigación para un trabajo futuro.

IV.3 Concurrencia

En esta sección estudiaremos el grado de entrelazamiento del sistema de dos dímeros acoplados mediante un cuantificador conocido como concurrencia, $\mathcal{C}(\rho)$. Uno de nue-

stros propósitos es explorar en qué medida esta cantidad abstracta se relaciona con la corriente del sistema, la cual es una cantidad medible en los experimentos. Para esto se presenta un análisis de la corriente y la concurrencia como función de los distintos parámetros de interés en el sistema antes mencionado.

En la figura 24 ilustramos gráficamente la corriente y la concurrencia como función de B para un valor fijo de Γ y diferentes valores de J , en donde podemos apreciar diversos comportamientos de estas cantidades. Destacamos el comportamiento de $\mathcal{C}(\rho)$, la cual exhibe dos máximos bien definidos. Se observa que conforme se incrementa el valor de J , la amplitud del primer (segundo) máximo de la concurrencia disminuye (aumenta). Además, en la figura 24(b), se observa que uno de los máximos de concurrencia alcanza un valor límite. Este punto coincide con el inicio de un comportamiento constante en la corriente.

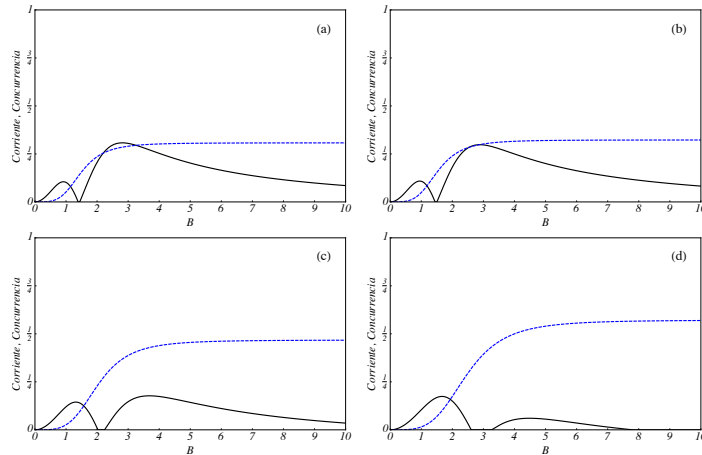


Figura 24: Concurrencia $\mathcal{C}(\rho)$ (línea negra sólida) y corriente electrónica I' (línea azul a trazos) como función de B , para valores de $\Gamma = 4$. (a) $J = 1$, (b) $J = 1.04$, (c) $J = 1.5$ y (d) $J = 2$. En general la concurrencia varía en el intervalo $\mathcal{C}(\rho) \in [0, 1]$.

Observamos que a medida que el valor de J aumenta y se acerca al de Γ , el segundo máximo de concurrencia disminuye. Este fenómeno se ilustra claramente en la figura

25, donde ahora se ha mantenido el parámetro J constante y se ha variado Γ . En ninguno de los casos analizados se observan dos máximos de concurrencia. Esto se debe a que, en algunos casos, el valor de J es mayor o igual al de Γ . Este resultado destaca la influencia de la relación entre J y Γ en la cantidad e intensidad de los máximos de concurrencia en el sistema.

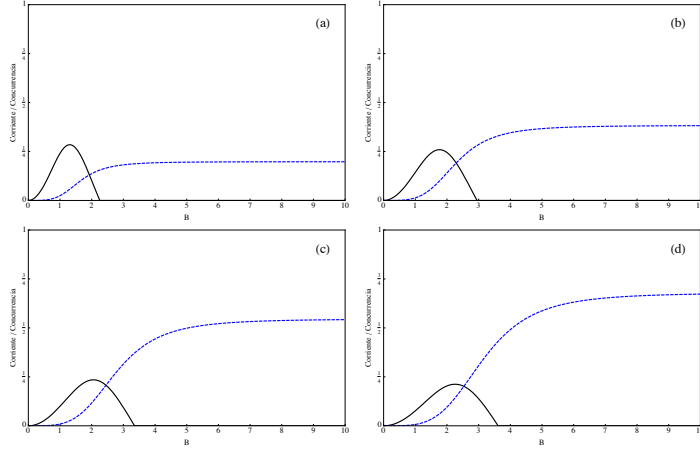


Figura 25: Concurrencia $\mathcal{C}(\rho)$ (línea negra sólida) y corriente electrónica I' (línea azul a trazos) como función de B , para valores fijos de $J = 3$. (a) $\Gamma = 1$, (b) $\Gamma = 2$, (c) $\Gamma = 3$ y (d) $\Gamma = 4$.

En la figura 26 se presenta una comparación de $\mathcal{C}(\rho)$ y de las poblaciones como función de B . Se muestra cómo el segundo máximo de la concurrencia aparece antes de que el sistema experimente la transición hacia el nuevo sistema de dos puntos cuánticos, para después disminuir hasta llegar a 0. Esto implica que conforme el sistema evoluciona la concurrencia disminuye, y al llegar por completo a un estado de dos puntos cuánticos con dos niveles, el grado de entrelazamiento es nulo. En este punto, el sistema es separable, lo que significa que sus componentes pueden considerarse como sistemas independientes en lugar de estar fuertemente entrelazados. Este comportamiento en la concurrencia proporciona información valiosa sobre la dinámica y las transiciones que

experimenta el sistema a medida que se modifican los parámetros o las condiciones.

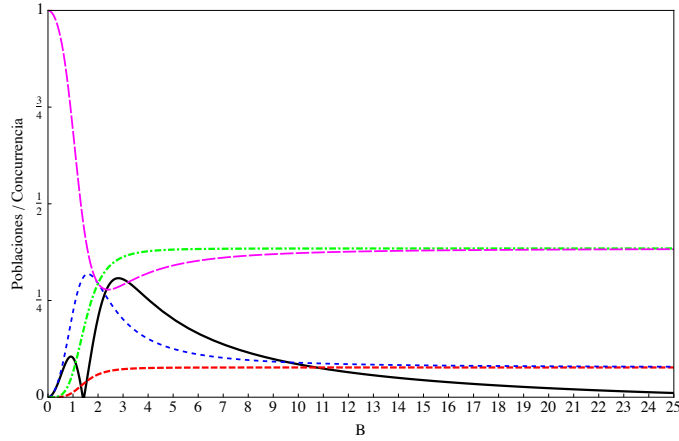


Figura 26: Poblaciones como función del campo magnético B para un sistema de dos dímeros con $\Gamma_D = \Gamma_S = 4$, $J = 1$ y $\theta = \pi/2$. La línea roja corresponde a ρ_{44} , la línea azul a trazos a ρ_{33} , la línea magenta a trazos a ρ_{11} y la línea verde punteada a ρ_{22} .

En la figura 27 observamos que cuando las poblaciones se igualan la concurrencia presenta un solo máximo. Esto contrasta con la figura 26, donde se aprecian dos máximos de concurrencia en un sistema compuesto por dos puntos cuánticos con dos niveles cada uno.

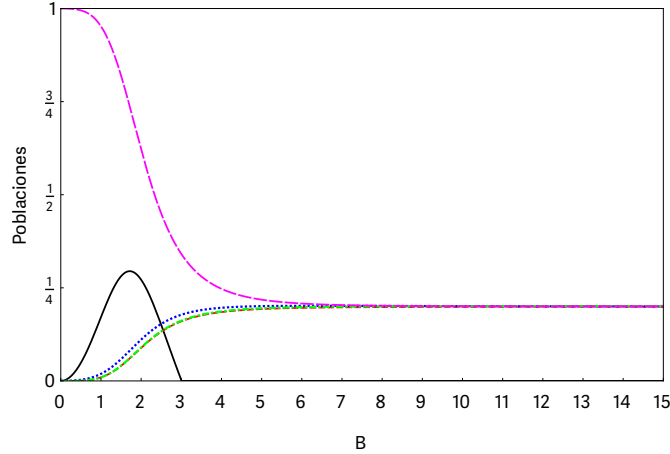


Figura 27: Poblaciones como función del campo magnético B para un sistema de dos dímeros con $\Gamma_D = 1$, $J = 5$ y $\theta = \pi/2$. La línea roja corresponde a ρ_{44} , la línea azul a trazos a ρ_{33} , la línea magenta a trazos a ρ_{11} y la línea verde a puntos a ρ_{22} .

Lo anterior nos sugiere que los dos máximos de concurrencia presentados efectivamente se deben a un sistema de dos puntos cuánticos con dos niveles. Además, hemos observado que en aquellos puntos donde las poblaciones convergen, la concurrencia del sistema se anula por completo. Esta interesante observación plantea la conjetura de que el sistema podría, en ese momento, exhibir un comportamiento análogo al de un solo punto cuántico.

IV.4 Corriente electrónica y concurrencia para el sistema parametrizado

En esta sección se analiza el modelo presentado en la sección IV.1 bajo una parametrización la cual se discute en el capítulo III, en donde se ha parametrizado el sistema en su totalidad, obteniendo así una nueva expresión para el Hamiltoniano, ecuación (56), así como una nueva solución analítica para la corriente electrónica \tilde{I} , como función de un

nuevo parámetro $g = 2J/\alpha B$, la dirección del campo magnético θ así como las razones de tunelamiento a los contactos, dadas por $\tilde{\Gamma}_S$ y $\tilde{\Gamma}_D$.

$$\tilde{I} = \frac{4\tilde{\Gamma}_D\tilde{\Gamma}_Sg^2\sin^4\theta}{\tilde{\Gamma}_D^2\tilde{\Gamma}_Sg^4 + 16\tilde{\Gamma}_Sg^4\cos^2\theta + 32\tilde{\Gamma}_Sg^2\cos^2\theta\sin^2\theta + 2\tilde{\Gamma}_D^2\tilde{\Gamma}_S\sin(\theta)^4 + 4\tilde{\Gamma}_Dg^2\sin^4\theta + 16\tilde{\Gamma}_Sg^2\sin^4\theta}, \quad (73)$$

donde $\tilde{\Gamma}_S = \Gamma_S/(B/2)$ y $\tilde{\Gamma}_D = \Gamma_D/(B/2)$, esto debido a la parametrización en la ecuación de Lindblad. La expresión anterior puede simplificarse tomando los casos particulares donde $\tilde{\Gamma}_S = \tilde{\Gamma}_D$, obteniendo así,

$$\tilde{I} = \frac{4\tilde{\Gamma}_D^2g^2\sin^4\theta}{2\tilde{\Gamma}_D^3\sin^4\theta + \tilde{\Gamma}_D^3g^4 + 16\tilde{\Gamma}_Dg^4\cos^2\theta + 20\tilde{\Gamma}_Dg^2\sin^4\theta + 32\tilde{\Gamma}_Dg^2\sin^2\theta\cos^2\theta}. \quad (74)$$

A diferencia del sistema estudiado anteriormente, al tener un sistema parametrizado siempre será posible obtener una máximo de corriente, el cual ocurre cuando,

$$g_{max} = \frac{2^{1/4}\sqrt{\tilde{\Gamma}_D}\sin\theta}{(\tilde{\Gamma}_D^2 + 16\cos^2\theta)^{1/4}}, \quad (75)$$

por lo que al sustituir la ecuación (75) en (74) obtenemos una expresión para la corriente máxima

$$\tilde{I}_{max} = \frac{2\sqrt{2}\tilde{\Gamma}_D\sin^2\theta}{2\tilde{\Gamma}_D\sqrt{\tilde{\Gamma}_D^2 + 8\cos(2\theta)} + 8 + 3\sqrt{2}\cos(2\theta) + 13\sqrt{2}}. \quad (76)$$

A continuación se muestra una serie de gráficas de la corriente como función de g para diferentes valores de $\tilde{\Gamma}_D$ y θ .

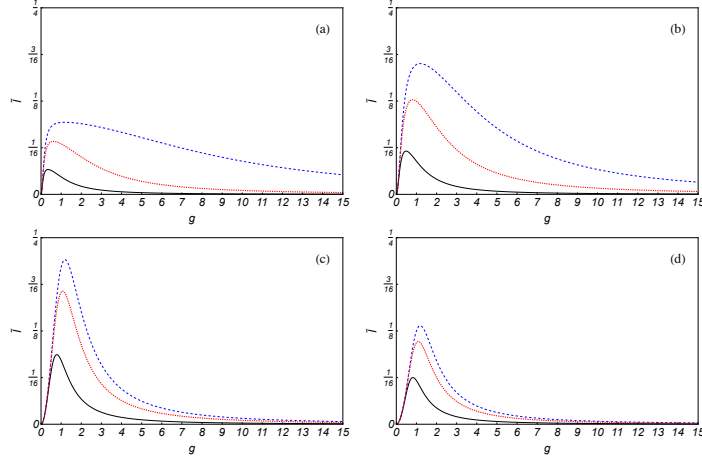


Figura 28: Corriente electrónica \tilde{I} como función de g para diferentes valores de Γ_D : (a) $\Gamma_D = 0.5$, (b) $\Gamma_D = 1$, (c) $\Gamma_D = 5$ y (d) $\Gamma_D = 10$. Se grafican en cada inciso tres posibles direcciones. $\theta = \pi/4$ (línea negra continua), $\theta = \pi/2$ (línea azul a trazos) y $\theta = 3\pi/8$ (línea roja a puntos).

De la figura 28 observamos que la corriente muestra el mismo comportamiento para los distintos valores de Γ_D y θ . Sin embargo, la intensidad de la corriente muestra un comportamiento inusual conforme Γ_D se incrementa. En los casos de las figuras 28(a)-(c), se observa que a medida que Γ_D aumenta la intensidad de la corriente también lo hace, esto para cualquier valor de θ . Sin embargo, en la figura 28(d) se pierde este patrón ya que la intensidad de la corriente disminuye. En la siguiente tabla se muestran los valores máximos de corriente para cada valor del θ , vemos que efectivamente la corriente presenta una disminución en su intensidad conforme Γ_D crece hasta llegar a su valor máximo $\Gamma_{D_{max}}$, a partir del cual la intensidad comienza a disminuir.

θ	\tilde{I}_{max}	$\tilde{I}_{max} (\Gamma_D = 1)$	$\tilde{I}_{max} (\Gamma_{D_{max}})$	$\tilde{I}_{max} (\Gamma_D = 5)$	$I_{max} (\Gamma_D = 10)$
$\pi/2$	$\frac{2\Gamma_D}{10+\sqrt{2}\Gamma_D^2}$	0.1752	0.2691	0.22	0.1320
$\pi/4$	$\frac{\Gamma_D}{13+\sqrt{2}\Gamma_D\sqrt{8+\Gamma_D^2}}$	0.0579	0.0992336	0.0932	0.0625
$3\pi/8$	$\frac{2\Gamma_D \cos^2(\frac{\pi}{8})}{\sqrt{2}\Gamma_D\sqrt{\Gamma_D^2-4\sqrt{2}+8-\frac{3}{\sqrt{2}}+13}}$	0.126786	0.203522	0.178367	0.110889

Tabla I: Maximos de corriente electronica \tilde{I} para distintos valores de θ y Γ , en donde $\Gamma_{D_{max}} = 2.6591$ para el cual $\tilde{I}_{max} (\Gamma_{D_{max}})$ es maxima independientemente del valor de θ .

La observacion previamente senalada se evidencia en la figura 29 donde se aprecia claramente la existencia de un valor maximo para Γ_D . Esto resulta de gran interes, dado que sugiere que el parmetro Γ_D desempea un papel crucial en la optimizacion del transporte electronico.

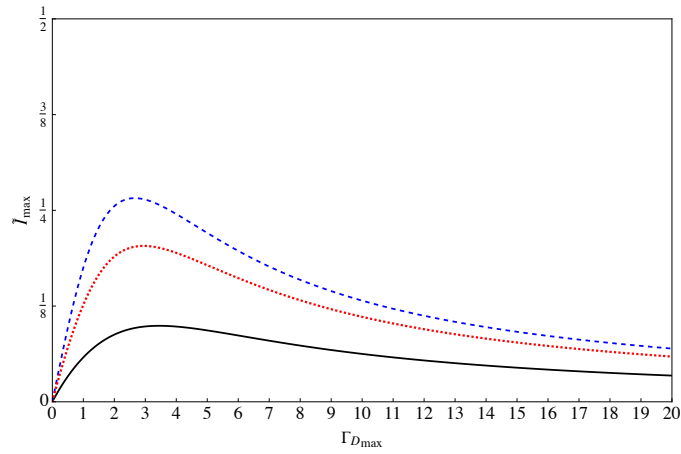


Figura 29: Corriente maxima como funcion de $\Gamma_{D_{max}}$ para distintos valores de la direccion del campo: $\theta = \pi/4$ (lnea negra continua), $\theta = \pi/2$ (lnea azul a trazos) y $\theta = 3\pi/8$ (lnea roja a puntos).

En la figura 30 se muestran mapas de densidad y sus respectivos contornos como funciones de Γ_D y g para distintos valores de θ . Se puede observar claramente que

existe un valor de Γ_D donde la corriente es máxima, y fuera de este valor la corriente disminuye, en concordancia con los resultados presentados en la tabla I. En particular es interesante destacar que para un ángulo $\theta = \pi/2$ (figura 30a) es posible obtener el mayor paso de corriente en el sistema.

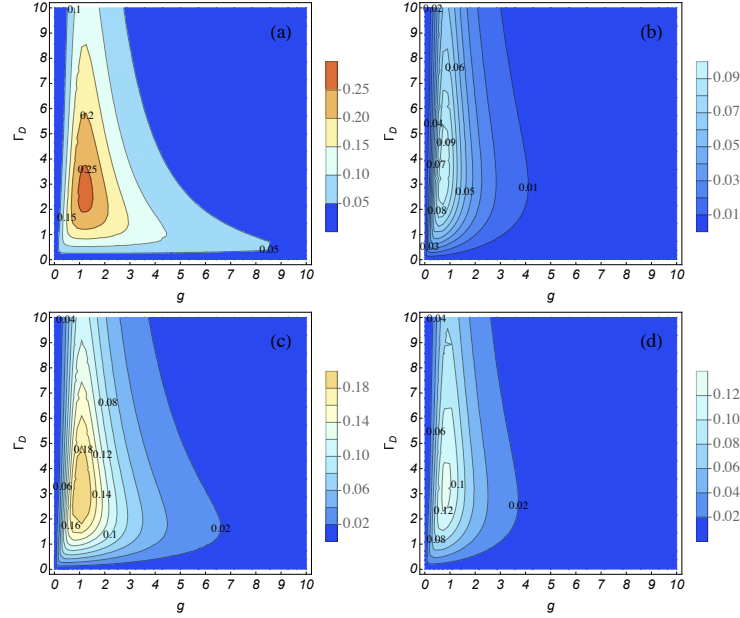


Figura 30: Mapa de densidad de la corriente electrónica I como función de Γ_D y g para las siguientes direcciones: (a) $\theta = \pi/2$, (b) $\theta = \pi/4$, (c) $\theta = 3\pi/8$ y (d) $\theta = 5\pi/7$.

Concurrencia

A continuación presentamos el análisis del comportamiento de la corriente y la concurrencia en nuestro sistema de estudio. En la figura 31 mostramos lo siguiente: cuando la corriente alcanza su valor máximo, la concurrencia entre los estados cuánticos se reduce a cero, como se muestra en las figuras 31(a)-(b). Este fenómeno sugiere una relación inversa entre la corriente y el grado de entrelazamiento en el sistema: a menor entrelazamiento, mayor corriente. Además, en las figuras 31(c)-(d), se examina cómo el valor del parámetro Γ_D afecta la concurrencia. Se observa que a medida que Γ_D aumenta, la

separación que previamente existía en la concurrencia disminuye gradualmente, hasta que finalmente se unen en un valor de $\sqrt{2}$. Es importante destacar que incluso en el punto de máxima corriente, todavía se observa cierto grado de entrelazamiento en el sistema como se muestra en las figuras 31(c)-(d). Esto significa que, a pesar de un alto valor de la corriente, aún existen correlaciones cuánticas en el sistema, aunque estas últimas son más débiles.

Este análisis revela la compleja relación entre la corriente electrónica, el entrelazamiento cuántico y el parámetro Γ_D en nuestro sistema.

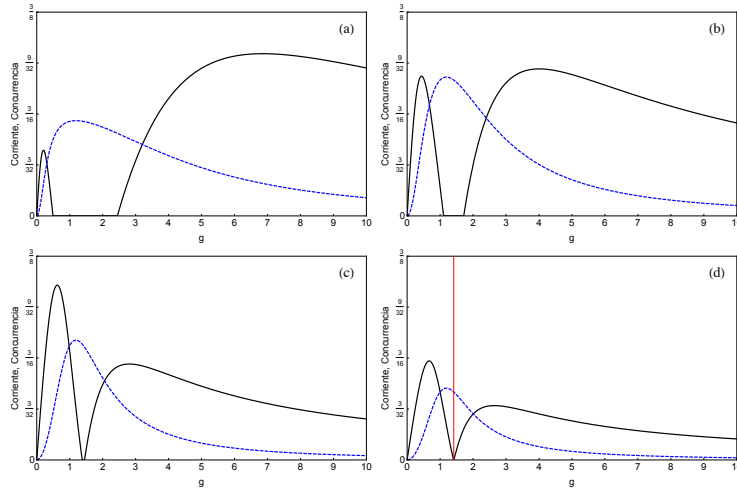


Figura 31: Corriente electrónica (línea azul a puntos) y concurrencia (línea negra continua) como función del parámetro g , para un valor fijo de $\theta = \pi/2$. (a) $\Gamma = 1$, (b) $\Gamma = 2$, (c) $\Gamma = 5$ y (d) $\Gamma = 10$. La línea roja corresponde a $g = \sqrt{2}$.

En la figura 32, se presentan mapas de densidad de la concurrencia como función de Γ_D y g para distintos valores θ , lo que permite realizar un análisis más completo. Se observa claramente la persistencia de dos máximos de correlación, separados por un intervalo identificable. Este patrón indica que, sin importar las condiciones específicas, el sistema presenta dos puntos de máxima correlación cuántica. Es importante destacar que el intervalo entre estos máximos es más amplio cuando el valor de θ es igual a $\pi/2$

como se aprecia en la figura 32(a). No obstante, en esta configuración, se registra el nivel más alto de correlación en el sistema, tanto a la izquierda como a la derecha del intervalo. Además, en la figura 32, se aprecia que el valor máximo de g sigue un recorrido cercano al valor cero de la concurrencia, que es consistente con lo observado en la figura 31.

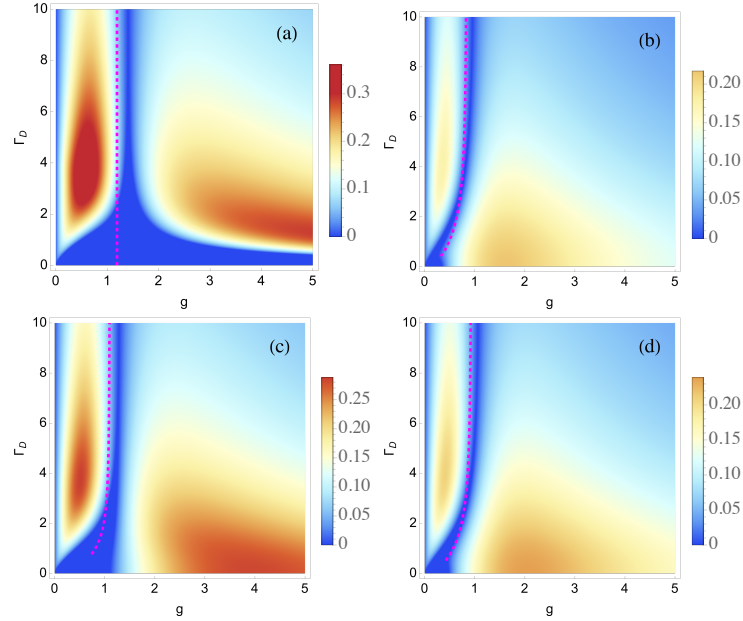


Figura 32: Mapa de densidad de la concurrencia $\mathcal{C}(\rho)$ como función de Γ_D y g , para diferentes valores θ dados por: (a) $\theta = \pi/2$, (b) $\theta = \pi/4$, (c) $\theta = 3\pi/8$ y (d) $\theta = 5\pi/7$. La línea roja a puntos corresponde al valor de g_{max} dada por la ecuación (75).

De lo anterior concluimos que al tener un paso máximo de corriente electrónica no es posible tener mayor entrelazamiento, es decir las correlaciones cuánticas se pierden ante el paso de la corriente electrónica.

Capítulo V

CONCLUSIONES

En este trabajo de tesis se investigaron las propiedades de transporte electrónico en un sistema abierto compuesto por dos dímeros acoplados. Dicho sistema demuestra similitudes con el modelo de SSH, particularmente en su estructura, que incluye dos celdas con dos sitios cada una, facilitando de esta manera los procesos de tuneo tanto dentro de la misma celda (intra-celda) como entre celdas adyacentes (inter-celda). Una contribución destacada de nuestro estudio es la modificación y extensión del modelo SSH para su implementación en un entorno de sistema abierto. Esta extensión permitió la integración de acoplamientos con contactos externos, proporcionando así una nueva perspectiva para la investigación de las propiedades de transporte electrónico en el sistema. De esta forma, nuestro sistema puede ser considerado como una configuración lineal de cuatro puntos cuánticos con sus respectivas energías de sitio, tuneos entre estos y acoplamiento a los contactos externos (fuente y sumidero) caracterizados por razones de tunelaje constantes (Γ_S y Γ_D). Nuestro sistema está inspirado en un hamiltoniano XY (Yi *et al.*, 2004) para dos fermiones de espín- $\frac{1}{2}$ con acoplamiento J en presencia de un campo magnético B aplicado a uno de los cúbits. Hemos demostrado que mediante una transformación de similaridad, dicho modelo puede ser mapeado al de dos dímeros acoplados en donde los tuneos intracelda e intercelda así como la energías de sitio, estarán ahora relacionados con los parámetros de la magnitud y dirección del campo magnético, así como del acoplamiento de espín.

Se derivó una fórmula analítica para la corriente electrónica en el sistema mediante la solución de la ecuación de Lindblad en el régimen estacionario. De esta manera, la

expresión para la corriente está dada como función de las razones de tunelaje con los contactos, la magnitud B y la dirección azimutal θ del campo magnético, así como del acoplamiento de espín J . Con base en dicha expresión se estudió el comportamiento de la corriente electrónica I como función de B así como de J , en la dirección $\theta = \pi/2$. Se consideró el caso en donde los acoplamientos con los contactos son iguales *i.e.* $\Gamma = \Gamma_S = \Gamma_D$. Para el caso de I como función de B se encuentra que conforme la magnitud del campo se incrementa, la corriente se estabiliza a un valor fijo que depende de J . Sin embargo, en el caso en que $J/\Gamma \rightarrow \infty$, tienden al mismo valor asintótico, sin importar el valor J . De hecho, mediante una parametrización de la fórmula de corriente en términos de J/Γ , demostramos que dicho valor es $I = \Gamma/5$, que coincide con lo observado numéricamente. Por otro lado, el comportamiento de la corriente I' como función del acoplamiento J muestra un comportamiento distinto a lo mencionado anteriormente. Se muestra la existencia de dos regímenes en el comportamiento de I' , caracterizados por la razón B/Γ . En el primero de estos, cuando $B/\Gamma < 1$, la corriente presenta un máximo bien definido cuyo valor es calculado analíticamente. En el segundo régimen, cuando $B/\Gamma \gg 1$, el pico en la corriente desaparece, dando lugar a un comportamiento de I' caracterizado por un crecimiento monótono que tiende a estabilizarse a un valor constante. En el caso en que $B/\Gamma \gg 1$ ($B \rightarrow \infty$) se observa que el valor asintótico de la corriente es $I' = \Gamma/5$, lo cual se demuestra analíticamente. Este último resultado coincide con el obtenido anteriormente en el estudio de la corriente como función de B . También realizamos un estudio complementario basado en el análisis de las poblaciones en el sistema como función de B . En este análisis se mostró un comportamiento peculiar de la poblaciones conforme $B \rightarrow \infty$. Observamos dos regímenes caracterizados por los parámetros J y Γ . El primero de ellos es para valores de $J \leq \Gamma$, en donde las poblaciones se igualan por pares es decir, $\rho_{44} = \rho_{33}$ y $\rho_{22} = \rho_{11}$. Otro comportamiento se muestra en el segundo régimen conforme $J > \Gamma$, en donde todas las poblaciones tienden la mismo

valor *i.e.* $\rho_{44} = \rho_{33} = \rho_{22} = \rho_{11} = 1/5$. Como resultado de un análisis más detallado para entender el comportamiento de las poblaciones se demostró analíticamente que el sistema en el primer régimen pasa a ser de un sistema de dos dímeros (cuatro puntos cuánticos) acoplados a un sistema de dos puntos cuánticos acoplados con dos niveles. Lo anterior nos sugiere que ocurre una reorganización de los estados cuánticos a medida que el parámetro B se incrementa. Bajo esta observación podemos conjeturar que el segundo régimen podría ser el resultado de una reconfiguración a un nuevo sistema. Sin embargo, esta pregunta queda abierta para investigaciones futuras.

Exploramos el grado de entrelazamiento del sistema a través de un estudio numérico de la concurrencia $\mathcal{C}(\rho)$ como función de B . Nuestros resultados revelan la presencia de dos máximos distintos en la concurrencia lo cual es un comportamiento peculiar que está claramente influenciado por los parámetros J y Γ . A medida que se incrementando el valor de J y nos acercamos al valor de Γ , observamos que el segundo máximo de concurrencia disminuye en intensidad hasta desaparecer por completo. Es decir, cuando J es aproximadamente menor que Γ la concurrencia exhibe dos máximos, pero cuando J es aproximadamente mayor que Γ se presenta un solo máximo. Este fenómeno sugiere una relación entre los parámetros J y Γ como se ha mostrado a lo largo del estudio de esta tesis. Estos hallazgos tienen implicaciones significativas para la manipulación y control del entrelazamiento en sistemas cuánticos, señalando la importancia de ajustar adecuadamente los parámetros para lograr ciertos comportamientos deseados. Realizando un análisis de la concurrencia y las poblaciones observamos que la concurrencia presenta dos máximos bien definidos para el sistema de dos puntos cuánticos con dos niveles, y presenta un solo máximo al igualarse todas las poblaciones, siendo nula la concurrencia cuando los sistemas se reorganizan a uno nuevo. Este fenómeno sugiere una fuerte dependencia de la concurrencia respecto a la reconfiguración específica del sistema. Este hallazgo abre la puerta a futuras investigaciones que exploren de manera

más detallada la relación entre la dinámica del entrelazamiento y la variabilidad en las configuraciones cuánticas.

Para abordar el análisis del sistema de manera más general, implementamos una parametrización en la ecuación de Linblad que nos permitió obtener una nueva fórmula para la corriente electrónica, representada por \tilde{I} . Esta fórmula se relaciona con la corriente original I mediante $\tilde{I} = I/(B/2)$, y simplifica las variables introduciendo $g = 2J/\alpha B$. A través de esta parametrización, logramos derivar una expresión analítica para el máximo de corriente \tilde{I}_{max} , lo cual no era posible en el sistema no parametrizado excepto bajo ciertas condiciones. Se identificó que la corriente alcanza su pico máximo en un valor específico de Γ_D , después del cual comienza a decrecer, destacando así la influencia de Γ_D en la optimización del transporte electrónico. La parametrización también revela con mayor claridad la relación inversa entre el transporte de carga y el entrelazamiento cuántico. Observamos que un aumento en la corriente conlleva a una disminución del entrelazamiento, sugiriendo que a menor entrelazamiento, tendremos mayor corriente. Además, se encontró que el entrelazamiento es máximo cuando $\theta = \pi/2$.

Las metodologías y hallazgos presentados en este trabajo de tesis trazan un camino prometedor para futuras investigaciones en el área de transporte y el entrelazamiento cuántico.

Referencias

- Armour, A. D. y MacKinnon, A. (2002). Transport via a quantum shuttle. *Phys. Rev. B*, **66**: 035333–1–035333–10.
- Arndt, M., Nairz, O., Vos-Andreae, J., Keller, C., van der Zouw, G., y Zeilinger, A. (1999). Wave–particle duality of C_{60} molecules. *Nature*, **401**(6754): 680–682.
- Asbóth, J. K., Oroszlány, L., Pályi, A., Asbóth, J. K., Oroszlány, L., y Pályi, A. (2016). The su–schrieffer–heeger (ssh) model. *A Short Course on Topological Insulators: Band Structure and Edge States in One and Two Dimensions*, páginas 1–22.
- Ashoori, R. C. (1996). Electrons in artificial atoms. *Nature*, **379**(6564): 413–419.
- Audretsch, J. (2007). *Entangled Systems: New Directions in Quantum Physics*. Wiley-VCH, Verlag GmbH & Co. KGaA.
- Barrett, M., Chiaverini, J., Schaetz, T., Britton, J., Itano, W., Jost, J., Knill, E., Langer, C., Leibfried, D., Ozeri, R., *et al.* (2004). Deterministic quantum teleportation of atomic qubits. *Nature*, **429**(6993): 737–739.
- Bell, J. S. (1964). On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, **1**: 195–200.
- Bennett, C. H. (1995). Quantum information and computation. *Physics Today*, **48**: 24–30.
- Bennett, C. H. y Wiesner, S. J. (1992). Communication via one- and two-particle operators on einstein-podolsky-rosen states. *Phys. Rev. Lett.*, **69**: 2881–2884.
- Bennett, C. H., Bernstein, H. J., Popescu, S., y Schumacher, B. (1996). Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A*, **53**: 2046–2052.
- Björk, M. T., Thelander, C., Hansen, A. E., Jensen, L. E., Larsson, M. W., Wallenberg, L. R., y Samuelson, L. (2004). Few-electron quantum dots in nanowires. *Nano Letters*, **4**(9): 1621–1625.
- Blum, K. (1996). Density matrix theory and applications.
- Bose, S., Vedral, V., y Knight, P. L. (1998). Multiparticle generalization of entanglement swapping. *Phys. Rev. A*, **57**: 822–829.
- Brandes, T. y Kramer, B. (1999). Spontaneous emission of phonons by coupled quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, **83**: 3021–3024.
- Breuer, H. P. y Petruccione, F. (2002). *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press.

- Brooks, M. (2012). *Quantum computing and communications*. Springer Science & Business Media.
- Brum, J. A. y Hawrylak, P. (1997). Coupled quantum dots as quantum exclusive-or gate. *Superlattices and Microstructures*, **22**(3): 431–436.
- Buitelaar, M. R., Bachtold, A., Nussbaumer, T., Iqbal, M., y Schönenberger, C. (2002). Multiwall carbon nanotubes as quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, **88**: 156801.
- Burkard, G., Loss, D., y DiVincenzo, D. P. (1999). Coupled quantum dots as quantum gates. *Physical Review B*, **59**: 2070.
- Chouikha, W. B., Jaziri, S., y Bennaceur, R. (2003). Measure of Entanglement States of Two Interacting Electrons in Vertically Coupled Quantum Dots Induced by a Time-Dependent Electric Field. *Journal of Superconductivity*, **16**(2): 313–317.
- Creffield, C. E. y Platero, G. (2002). ac-driven localization in a two-electron quantum dot molecule. *Phys. Rev. B*, **65**: 113304.
- David, D. (1985). Quantum theory, the churchâ€™turing principle and the universal quantum computer. *PROCEEDINGS OF THE ROYAL SOCIETY A*, **400**: 97–117.
- de LLano, M. (1996). *Mecánica cuántica*. UNAM.
- Ekert, A. K. (1991). Quantum cryptography based on bell’s theorem. *Phys. Rev. Lett.*, **67**: 661–663.
- Fano, U. (1957). Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques. *Rev. Mod. Phys.*, **29**: 74–93.
- Ferry, D. K. y Goodnick, S. M. (1997). *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, United Kingdom. Capítulo 2.
- Fujisawa, T., Austing, D. G., Tokura, Y., Hirayama, Y., y Tarucha, S. (2002). Allowed and forbidden transitions in artificial hydrogen and helium atoms. *Letters to Nature*, **419**: 278.
- Gorelik, L. Y., Isacsson, A., Voinova, M. V., Kasemo, B., Shekhter, R. I., y Jonson, M. (1998). Shuttle mechanism for charge transfer in coulomb blockade nanostructures. *Phys. Rev. Lett.*, **80**: 4526–4529.
- Gorini, V., Kossakowski, A., y Sudarshan, E. C. G. (1976). Completely positive dynamical semigroups of n-level systems. *Journal of Mathematical Physics*, **17**(5): 821–825.
- Hanson, R., Vandersypen, L. M. K., van Beveren, L. H. W., Elzerman, J. M., Vink, I. T., y Kowenhoven, L. P. (2004). Semiconductor few-electron quantum dot operated as a bipolar spin filter. *Physical Review B*, **70**: 241304(R).
- Hanson, R., Kouwenhoven, L. P., Petta, J. R., Tarucha, S., y Vandersypen, L. M. K. (2007). Spins in few-electron quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, **79**: 1217–1265.

- Hensen, B., Bernien, H., Dréau, A. E., Reiserer, A., Kalb, N., Blok, M. S., Ruitenberg, J., Vermeulen, R. F. L., Schouten, R. N., Abellán, C., Amaya, W., Pruneri, V., Mitchell, M. W., Markham, M., Twitchen, D. J., Elkouss, D., Wehner, S., Taminiau, T. H., y Hanson, R. (2015). Loophole-free bell inequality violation using electron spins separated by 1.3 kilometres. *Nature*, **526**(7575): 682–686.
- Horodecki, K., Horodecki, M., Horodecki, P., y Oppenheim, J. (2009). General paradigm for distilling classical key from quantum states. *IEEE Transactions on Information Theory*, **55**(4): 1898–1929.
- Hu, X., Koiller, B., y Das Sarma, S. (2005). Charge qubits in semiconductor quantum computer architecture: Tunnel coupling and decoherence. *Phys. Rev. B*, **71**: 235332.
- János K. Asbóth, L. O. y Pályi, A. (2016). *A Short Course on Topological Insulators. Band Structure and Edge States in One and Two Dimensions*. Springer International Publishing.
- Kastner, M. (1993). Artificial atoms. *Physics Today*, **46**: 24.
- Kouwenhoven, L. y Marcus, C. (1998). Quantum dots. *Physics World*, **11**(6): 35.
- Kouwenhoven, L. P., Schön, G., y Sohn, L. L. (1997). *Introduction to Mesoscopic Electron Transport*, páginas 1–44. Springer Netherlands, Dordrecht. ISBN 978-94-015-8839-3.
- Kouwenhoven, L. P., Austing, D. G., y Tarucha, S. (2001). Few-electron quantum dots. *Reports on Progress in Physics*, **64**(6): 701.
- L Fedichkin, M. Y. y Valiev, K. A. (2000). Coherent charge qubits based on gaas quantum dots with a built-in barrier. *Nanotechnology*, **11**.
- Laird, E. A., Petta, J. R., Johnson, A. C., Marcus, C. M., Yacoby, A., Hanson, M. P., y Gossard, A. C. (2006). Effect of exchange interaction on spin dephasing in a double quantum dot. *Physical Review Letters*, **97**: 056801.
- Lindblad, G. (1976). On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, **48**: 119–130.
- Loss, D. y DiVincenzo, D. P. (1998). Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A*, **57**: 120.
- Manzano, D. (2020). A short introduction to the lindblad master equation. *AIP Advances*, **10**.
- McEuen, P. L. (1997). Artificial atoms: New boxes for electrons. *Science*, **278**(5344): 1729–1730.
- Mintert, F., Carvalho, A. R., Kuś, M., y Buchleitner, A. (2005). Measures and dynamics of entangled states. *Physics Reports*, **415**(4): 207–259.

- Mitin, V. V., Kochelap, V. A., y Stroschio, M. A. (2008). *Introduction to Nanoelectronics*. Cambridge University Press, United Kingdom. Capítulo 5.
- Moura Alves, C. (2005). *Detection of quantum entanglement in physical systems*. Tesis de doctorado, Merton College. University of Oxford, Oxford, England.
- Nalwa, H. S. (2000). *Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology*. Elsevier Inc. Introduccón.
- Nielsen, M. A. y Chuang, I. L. (2000). Quantum information and quantum computation.
- Nielsen, M. A. y Chuang, I. L. (2011). *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press. ISBN 9781107002173.
- Pan, J.-W., Bouwmeester, D., Weinfurter, H., y Zeilinger, A. (1998). Experimental entanglement swapping: entangling photons that never interacted. *Physical review letters*, **80**(18): 3891.
- Pan, J.-W., Bouwmeester, D., Daniell, M., Weinfurter, H., y Zeilinger, A. (2000). Experimental test of quantum nonlocality in three-photon Greenberger-Horne-Zeilinger entanglement. *Nature*, **403**(6769): 515–519.
- Park, J., Pasupathy, A. N., Goldsmith, J. I., Chang, C., Yaish, Y., Petta, J. R., Rinkoski, M., Sethna, J. P., Abruna, H. D., McEuen, P. L., y Ralph, D. C. (2002). Coulomb blockade and the kondo effect in single-atom transistors. *Nature*, **417**(6890): 722–725.
- Petta, J. R. y Ralph, D. C. (2001). Studies of spin-orbit scattering in noble-metal nanoparticles using energy-level tunneling spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, **87**: 266801.
- Plenio, M. B. y Vedral, V. (1998). Teleportation, entanglement and thermodynamics in the quantum world. *Contemporary physics*, **39**(6): 431–446.
- Quiroga, L. y Johnson, N. F. (1999). Entangled bell and greenberger-horne-zeilinger states of excitons in coupled quantum dots. *Physical review letters*, **83**(11): 2270.
- Reed, M. A. (1993). Quantum dots. *Scientific American*, **268**(1): 118–123.
- Riebe, M., Häffner, H., Roos, C., Hänsel, W., Benhelm, J., Lancaster, G., Körber, T., Becher, C., Schmidt-Kaler, F., James, D., *et al.* (2004). Deterministic quantum teleportation with atoms. *Nature*, **429**(6993): 734–737.
- Rieffel, E. y Polak, W. (2000). An introduction to quantum computing for non-physicists. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, **32**(3): 300–335.
- Sakurai, J. J. (1994). *Modern Quantum Mechanics. Revised Edition*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
- Saraga, D. S. y Loss, D. (2003). Spin-entangled currents created by a triple quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 166803.

- Schumacher, B. (1995). Quantum coding. *Physical Review A*, **51**(4): 2738.
- Solenov, D. y Fedichkin, L. (2006). Nonunitary quantum walks on hypercycles. *Phys. Rev. A*, **73**: 012308.
- Steane, A. (1998). Quantum computing. *Reports on Progress in Physics*, **61**(2): 117.
- Su, W. P., Schrieffer, J. R., y Heeger, A. J. (1979). Solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. Lett.*, **42**: 1698–1701.
- Tamborenea, P. y Metiu, H. (2001). Localization and entanglement of two interacting electrons in a quantum-dot molecule. *Europhysics Letters*, **53**(6): 776.
- Tamura, H., Shiraishi, K., y Takayanagi, H. (2003). Quantum dot atoms, molecules, and superlattices. *Quantum Dots and Nanowires*, página 67.
- Tanamoto, T. (2000). Quantum gates by coupled asymmetric quantum dots and controlled-not-gate operation. *Phys. Rev. A*, **61**: 022305.
- Unruh, W. G. (1995). Maintaining coherence in quantum computers. *Phys. Rev. A*, **51**: 992–997.
- Van der Wiel, W. G., De Franceschi, S., Elzerman, J. M., Fujisawa, T., Tarucha, S., y Kouwenhoven, L. P. (2002). Electron transport through double quantum dots. *Reviews of modern physics*, **75**(1): 1.
- Vidal, G. y Werner, R. F. (2002). Computable measure of entanglement. *Physical Review A*, **65**(3): 032314.
- Villavicencio, J., Maldonado, I., Sánchez, R., Cota, E., y Platero, G. (2008). Tunnel spectroscopy in ac-driven quantum dot nanoresonators. *App. Phys. Lett.*, **92**: 192102–1,192102–3.
- von Delft, J. y Ralph, D. (2001). Spectroscopy of discrete energy levels in ultrasmall metallic grains. *Physics Reports*, **345**(2-3): 61 – 173.
- Vorrath, T. y Brandes, T. (2003). Dicke effect in the tunnel current through two double quantum dots. *Phys. Rev. B*, **68**: 035309.
- Wootters, W. (1996). Quantum information theory and statistics. *Quantum Information and Computation*, **1**: 27–47.
- Wootters, W. K. (1998). Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Phys. Rev. Lett.*, **80**: 2245–2248.
- Wootters, W. K. (2001). Entanglement of formation and concurrence. *Quantum Info. Comput.*, **1**(1): 27–44.
- Yao, X.-C., Wang, T.-X., Xu, P., Lu, H., Pan, G.-S., Bao, X.-H., Peng, C.-Z., Lu, C.-Y., Chen, Y.-A., y Pan, J.-W. (2012). Observation of eight-photon entanglement. *Nature Photonics*, **6**(4): 225–228.

Yi, X. X., Wang, L. C., y Zheng, T. Y. (2004). Berry phase in a composite system.
Phys. Rev. Lett., **92**: 150406.

Apéndice A

Derivación de la ecuación de Lindblad

Los sistemas cuánticos abiertos (Breuer y Petruccione, 2002) están intrínsecamente interconectados con su entorno, y esta interacción transforma la dinámica unitaria característica en un proceso irreversible en el tiempo. Cuando el tiempo de correlación de las fluctuaciones en el reservorio es comparable a la escala temporal más pequeña de la dinámica conjunta, y en un régimen de acoplamiento débil, se puede aplicar una aproximación Markoviana. En este caso, la evolución del sistema, que se describe a través de su matriz densidad, sigue una ecuación de tipo Lindblad (Breuer y Petruccione, 2002). Estas ecuaciones proporcionan la estructura más general para la evolución de la matriz densidad, asegurando simultáneamente la hermiticidad y la positividad de la misma (una matriz hermitiana, positiva definida).

A continuación se presenta una derivación de la ecuación de Lindblad (Breuer y Petruccione, 2002; Manzano, 2020). La derivación más común de la ecuación maestra de Lindblad se basa en la teoría cuántica para sistemas abiertos. La ecuación de Lindblad es entonces una ecuación de movimiento efectiva para un subsistema que pertenece a un sistema más complicado (Breuer y Petruccione, 2002).

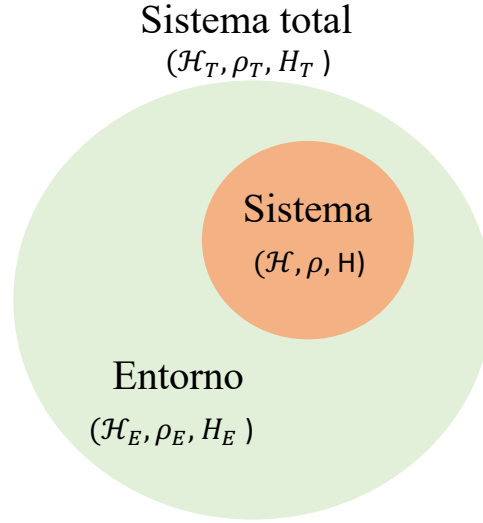


Figura 33: Sistema total (perteneciente a un espacio de Hilbert \mathcal{H}_T , con estados descritos por matrices de densidad ρ_T , y con dinámica determinada por un hamiltoniano H_T) dividido en el sistema de interés, sistema y el entorno.

Un sistema total que pertenece a un espacio de Hilbert \mathcal{H}_T se divide en nuestro sistema de interés, que pertenece a un espacio de Hilbert \mathcal{H} , y el entorno definido en \mathcal{H}_E , como se muestra en la figura (33). La evolución del sistema total está dada por la ecuación de von Neumann,

$$\dot{\rho}_T(t) = -i[H_T, \rho_T(t)]. \quad (77)$$

Como estamos interesados en la dinámica del sistema (S), sin tomar en cuenta el entorno, calculamos la traza de $\rho(t)$ sobre los grados de libertad del ambiente (E) para obtener la matriz de densidad reducida del sistema:

$$\rho(t) = \text{Tr}_E[\rho_T]. \quad (78)$$

El hamiltoniano total del sistema H_T se puede escribir en términos del hamiltoniano del sistema, H_S , del entorno, H_E , y de su interacción, H_I :

$$H_T = H \otimes \mathbb{I}_E + \mathbb{I}_S \otimes H_E + \alpha H_I, \quad (79)$$

siendo α una medida de la intensidad de la interacción sistema-entorno. El hamiltoniano de interacción puede escribirse como:

$$H_I = \sum_i S_i \otimes E_i, \quad (80)$$

con $S_i \in B(\mathcal{H})$ y $E_i \in B(\mathcal{H}_E)$. Para describir mejor la dinámica del sistema, utilizamos la representación de interacción (RI). A continuación algunas propiedades de la RI:

- En la RI las matrices de densidad evolucionan en el tiempo debido al hamiltoniano de interacción.
- Un operador arbitrario $O \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_T)$ se escribe en la RI por el operador dependiente del tiempo: $\hat{O}(t) = e^{i(H+H_E)t} O e^{-i(H+H_E)t}$

Procedemos ahora a transformar la ecuación (77) a la RI, por lo que partiendo de,

$$\hat{\rho}_T(t) = e^{i(H+H_E)t} \rho_T(t) e^{-i(H+H_E)t} \quad (81)$$

y derivando respecto a t , obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_T(t)}{dt} &= i(H + H_E) e^{i(H+H_E)t} \rho_T(t) e^{-i(H+H_E)t} \\ &+ e^{i(H+H_E)t} \frac{d\rho_T(t)}{dt} + e^{-i(H+H_E)t} \\ &- i e^{i(H+H_E)t} \rho_T(t) (H + H_E) e^{-i(H+H_E)t}, \end{aligned} \quad (82)$$

que después de algunas simplificaciones nos conduce a:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_T(t)}{dt} &= i(H + H_E) \hat{\rho}_T(t) \\ &+ e^{i(H+H_E)t} \frac{d\rho_T(t)}{dt} + e^{-i(H+H_E)t} \\ &- i \hat{\rho}_T(t) (H + H_E). \end{aligned} \quad (83)$$

Sustituyendo la ecuación (77) en la ecuación anterior

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_T(t)}{dt} &= i(H + H_E)\hat{\rho}_T(t) - i\hat{\rho}_T(t)(H + H_E) \\ &\quad - ie^{i(H+H_E)t} [H_T, \rho_T(t)] e^{-i(H+H_E)t}, \end{aligned} \quad (84)$$

y desarrollando el anticonmutador y con algunas simplificaciones obtenemos,

$$\frac{d\hat{\rho}_T(t)}{dt} = i[(H + H_E), \hat{\rho}_T(t)] - i[\hat{H}_T, \hat{\rho}_T(t)]. \quad (85)$$

En la fórmula anterior podemos representar a H_T como $H_T = (H + H_E) + \alpha H_I$, como se demuestra a continuación:

Demostración

$$\begin{aligned} \hat{H}_T &= e^{i(H+H_E)t} H_T e^{-i(H+H_E)t}; \\ &= e^{i(H+H_E)t} [(H + H_E) + \alpha H_I] e^{-i(H+H_E)t}; \\ &= e^{i(H+H_E)t} (H + H_E) e^{-i(H+H_E)t} \\ &\quad + e^{i(H+H_E)t} \alpha H_I e^{-i(H+H_E)t}; \\ &= (H + H_E) + \alpha \hat{H}_I. \end{aligned} \quad (86)$$

Fin de la demostración.

Finalmente, en la RI,

$$\frac{d\hat{\rho}_T(t)}{dt} = -i\alpha [\hat{H}_I, \hat{\rho}_T(t)]. \quad (87)$$

Integrando la ecuación anterior respecto al tiempo

$$\int_0^t \frac{d\hat{\rho}_T(s)}{ds} ds = -i\alpha \int_0^t [\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_T(s)] ds; \quad (88)$$

$$\hat{\rho}_T(s)|_{s=0}^{s=t} = -i\alpha \int_0^t [\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_T(s)] ds; \quad (89)$$

$$\hat{\rho}_T(t) = \hat{\rho}_T(0) - i\alpha \int_0^t ds [\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_T(s)]. \quad (90)$$

Mediante esta fórmula podemos obtener la solución exacta, pero aún tiene la complicación de calcular una integral en el espacio total de Hilbert. También es un hecho problemático que el estado $\tilde{\rho}(t)$ depende de la integración de la matriz de densidad en todos los tiempos anteriores. Para evitar esto, podemos introducir la ecuación (90) en la ecuación (87) dando lugar a:

$$\frac{d\hat{\rho}_T(t)}{dt} = -i\alpha \left[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}_T(0) \right] - \alpha^2 \int_0^t ds \left[\hat{H}_I(t), \left[\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_T(s) \right] \right], \quad (91)$$

que es conocida como la aproximación de Born. Utilizando la aproximación de Markov¹, que es equivalente a argumentar que $\hat{\rho}_T(s) = \hat{\rho}_T(t)$ (Breuer y Petruccione, 2002), tenemos que:

$$\frac{d\hat{\rho}_T(t)}{dt} = -i\alpha \left[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}_T(0) \right] - \alpha^2 \int_0^t ds \left[\hat{H}_I(t), \left[\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_T(t) \right] \right]. \quad (92)$$

De esta forma la evolución del sistema a un tiempo t sólo depende de su estado actual $\hat{\rho}_T(t)$. Como estamos interesados en la dinámica del sistema, eliminamos los grados de libertad del entorno calculando la traza sobre E (Entorno)

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} &= \text{Tr}_E \left[\frac{d\hat{\rho}_T(t)}{dt} \right] = -i\alpha \text{Tr}_E \left[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}_T(0) \right] \\ &\quad - \alpha^2 \int_0^t ds \text{Tr}_E \left[\hat{H}_I(t), \left[\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_T(t) \right] \right]. \end{aligned} \quad (93)$$

Ésta no es una ecuación cerrada de evolución temporal para $\hat{\rho}(t)$ porque la evolución temporal todavía depende de la matriz de densidad total $\hat{\rho}_T(t)$. Para proceder, necesitamos hacer dos suposiciones más:

- Aproximación 1: A un tiempo $t = 0$ el sistema y el ambiente tienen un estado separable ,

$$\rho_T(0) = \rho(0) \otimes \rho_E(0). \quad (94)$$

¹Un proceso Markoviano es aquel donde el comportamiento de este depende de su estado actual y no en su historia pasada. En este sentido, decimos que la dinámica del proceso no tiene memoria. Esta es una buena aproximación cuando la interacción con el ambiente es débil.

Esto significa que no existen correlaciones entre el sistema y el entorno. Este puede ser el caso si el sistema y el entorno no han interactuado en momentos anteriores o si las correlaciones entre ellos son de corta duración

- Aproximación 2: asumimos que el estado inicial del ambiente es térmico, lo que significa que está descrito por una matriz de densidad en la forma

$$\rho_E(0) = e^{-H_E/T} / \text{Tr} [e^{-H_E/T}], \quad (95)$$

siendo T la temperatura y tomando la constante de Boltzmann como $k_B = 1$.

Utilizando estas aproximaciones es posible evaluar el primer término de la ecuación (93)

$$\left[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}_T(0) \right] = \text{Tr}_E \left(\sum_i [S_i \otimes E_i, \hat{\rho}(0) \otimes \hat{\rho}_E(0)] \right). \quad (96)$$

Desarrollando el conmutador y utilizando la siguiente propiedad $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$, se obtiene,

$$\left[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}_T(0) \right] = \text{Tr}_E \left(\sum_i [S_i \hat{\rho}(0) \otimes E_i \hat{\rho}_E(0) - \hat{\rho}(0) S_i \otimes \hat{\rho}_E(0) E_i] \right). \quad (97)$$

Utilizando la siguiente propiedad de la traza a la ecuación anterior

$$\text{Tr}_b \left[\sum_{i,j,k,l} |a_i\rangle \langle a_j| \otimes |b_k\rangle \langle b_l| \right] \equiv \sum_{i,j} |a_i\rangle \langle a_j| \text{Tr} \left[\sum_{k,l} |b_k\rangle \langle b_l| \right], \quad (98)$$

se obtiene finalmente

$$\left[\hat{H}_I(t), \hat{\rho}_T(0) \right] = \sum_i (S_i \hat{\rho}(0) \text{Tr}_E (E_i \hat{\rho}_E(0)) - \hat{\rho}(0) S_i \text{Tr}_E (\hat{\rho}_E(0) E_i)). \quad (99)$$

Para calcular los valores de $\text{Tr}_E (E_i \hat{\rho}_E(0))$ recordemos que $\text{Tr}(A\rho) = \langle A \rangle$ por lo que $\text{Tr}_E (E_i \hat{\rho}_E(0)) = \langle E_i \rangle$ para todo valor de i . Por lo tanto, se puede suponer que

$$\text{Tr}_E (E_i \hat{\rho}_E(0)) = \langle E_i \rangle = 0, \quad (100)$$

por lo que podemos escribir la ecuación (93)

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = -\alpha^2 \int_0^t ds \text{Tr}_E \left[\hat{H}_I(t), \left[\hat{H}_I(s), \hat{\rho}_T(t) \right] \right]. \quad (101)$$

Esta ecuación todavía incluye el estado completo del sistema y el medio ambiente. Para desacoplar el sistema del entorno, tenemos que hacer una suposición más restrictiva. Como estamos trabajando en el régimen de acoplamiento débil, podemos suponer que el sistema y el entorno no están correlacionados durante todo el tiempo de evolución. Por supuesto, esto es sólo una aproximación. Debido a la interacción hamiltoniana, se espera que aparezcan algunas correlaciones entre el sistema y el entorno.

Por otro lado, podemos suponer que las escalas de tiempo de correlación (τ_{corr}) y relajación del ambiente (τ_{rel}) son mucho más pequeñas que la escala de tiempo típica del sistema (τ_{sys}), ya que la intensidad de acoplamiento (α) es muy pequeña. Por lo tanto, bajo esta fuerte suposición, podemos asumir que el estado del ambiente siempre es térmico y está desacoplado del estado del sistema $\hat{\rho}_T(t) = \hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)$. Por lo tanto,

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = -\alpha^2 \int_0^t ds \text{Tr}_E \left[\hat{H}_I(t), \left[\hat{H}_I(s), \hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0) \right] \right]. \quad (102)$$

La ecuación de movimiento ahora es independiente para el sistema y local en el tiempo. Todavía no es markoviano, ya que depende de la preparación del estado inicial del sistema.

Es posible obtener una ecuación Markoviana suponiendo que el integrando decae lo suficientemente rápido y que podemos extender la integración $0 \rightarrow t$ a $0 \rightarrow \infty$ sin alterar el resultado. Al hacerlo, y cambiando la variable integral a $s \rightarrow t - s$, obtenemos la ecuación de Redfield

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = -\alpha^2 \int_0^\infty ds \text{Tr}_E \left[\hat{H}_I(t), \left[\hat{H}_I(s - t), \hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0) \right] \right]. \quad (103)$$

Se sabe que esta ecuación no garantiza la positividad de los mapeos y, en ocasiones, da lugar a matrices de densidad que no son positivas. Para asegurar una positividad completa, necesitamos realizar una aproximación más, la *aproximación de la onda rotante* (rotating wave approximation, RWA). Esta aproximación involucra calcular un promedio sobre los términos de la matriz de densidad que oscilan rápidamente en

el tiempo. Por lo que es necesario desarrollar el hamiltoniano de interacción (H_I) en eigenoperadores del sistema S . Para hacerlo, necesitamos usar el espectro del superoperador $\tilde{H}A \equiv [H, A], \forall A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Los eigenvectores de este superoperador forman una base completa del espacio $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ lo que permite desarrollar a los operadores del sistema-entorno en

$$H_I = \sum_i S_i \otimes E_i, \quad (104)$$

utilizando la base

$$S_i = \sum_{\omega} S_i(\omega), \quad (105)$$

donde los operadores $S_i(\omega)$ satisfacen,

$$[H, S_i(\omega)] = -\omega S_i(\omega), \quad (106)$$

siendo ω los eigenvalores de \tilde{H} . Tomando el adjunto de la expresión anterior

$$[H, S_i^\dagger(\omega)] = \omega S_i^\dagger(\omega). \quad (107)$$

Para aplicar esta descomposición, es necesario pasar los operadores $S_i(\omega)$ y $S_i^\dagger(\omega)$ a la RI, esto es,

$$\hat{S}_i(\omega) = e^{iHt} S_i(\omega) e^{-iHt} \quad (108)$$

y

$$\hat{S}_i^\dagger(\omega) = e^{iHt} S_i^\dagger(\omega) e^{-iHt}. \quad (109)$$

Para expresar a $S_i(\omega)$ de una manera mas conveniente, se deriva con respecto al tiempo la ecuación (108)

$$\frac{d\hat{S}_i(\omega)}{dt} = \frac{d}{dt}[e^{iHt} S_i(\omega) e^{-iHt}]; \quad (110)$$

$$\frac{d\hat{S}_i(\omega)}{dt} = ie^{iHt} H S_i(\omega) e^{-iHt} - ie^{iHt} S_i(\omega) H e^{-iHt}. \quad (111)$$

Agrupando algunos términos y sustituyendo en la ecuación (106)

$$\frac{d\hat{S}_i(\omega)}{dt} = -i\omega e^{iHt} S_i(\omega) e^{-iHt}, \quad (112)$$

$$\frac{d\hat{S}_i(\omega)}{dt} = -i\omega S_i(\omega). \quad (113)$$

Integrando la ecuación interior

$$\hat{S}_i(\omega) = C e^{-i\omega t} \hat{S}_i(\omega, t) \quad (114)$$

con la condición inicial a $t = 0$,

$$\hat{S}_i(\omega) = e^{-i\omega t} S_i(\omega). \quad (115)$$

De la misma manera podemos obtener una expresión para $\hat{S}_i^\dagger(\omega)$

$$\hat{S}_i^\dagger(\omega) = e^{-i\omega t} S_i^\dagger(\omega). \quad (116)$$

La idea es ahora transformar a H_I

$$H_I = \sum_K S_K \otimes E_K, \quad (117)$$

con ayuda de los resultados anteriores. Para esto, primero cambiamos (117) a la RI y utilizamos las ecuaciones (115) y (116)

$$\hat{H}_I = e^{iHt} H_I e^{-iHt} = \sum_K e^{iHt} S_K e^{-iHt} \otimes e^{iHt} E_K e^{-iHt} \quad (118)$$

obteniendo

$$\hat{H}_I = \sum_K \hat{S}_K \otimes \tilde{E}_K. \quad (119)$$

Utilizando (115) tenemos,

$$\hat{H}_I = \sum_{K,\omega} \hat{S}_K(\omega) \otimes \tilde{E}_K, \quad (120)$$

donde $\tilde{E}_K = \tilde{E}_K(t)$. Sustituyendo (115) en la ecuación anterior

$$\hat{H}_I = \sum_{K,\omega} e^{-i\omega t} S_K(\omega) \otimes \tilde{E}_K. \quad (121)$$

Para combinar esta descomposición con la ecuación de Redfield, se desarrolla el conmutador de la ecuación (103)

$$\begin{aligned}
\left[\hat{H}_I(t), \left[\hat{H}_I(s-t), \hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0) \right] \right] &= \hat{H}_I(t) \hat{H}_I(t-s) (\hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)) \\
&\quad - \hat{H}_I(t) (\hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)) \hat{H}_I(t-s) \\
&\quad - \hat{H}_I(t-s) (\hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)) \hat{H}_I(t) \\
&\quad + (\hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)) \hat{H}_I(t-s) \hat{H}_I(t).
\end{aligned} \tag{122}$$

Sustituyendo en la ecuación (103)

$$\begin{aligned}
\dot{\hat{\rho}}(t) &= -\alpha^2 \text{Tr}_E \left[\int_0^\infty ds \hat{H}_I(t-s) (\hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)) \hat{H}_I(t) \right. \\
&\quad \left. - \int_0^\infty ds \hat{H}_I(t) \hat{H}_I(t-s) (\hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)) + h.c. \right].
\end{aligned} \tag{123}$$

Ahora aplicamos la descomposición de eigenvalores en términos de $S_k(\omega)$ para $\hat{H}_I(t-s)$ y en términos de $S_k^\dagger(\omega')$ por $\hat{H}_I(t)$, donde,

$$\begin{aligned}
\hat{H}_I(t) &= \sum_{k,\omega'} e^{i\omega't} S_k^\dagger(\omega') \otimes \tilde{E}_k^\dagger(\tau), \text{ para } S_k^\dagger; \\
\hat{H}_I(t-s) &= \sum_{\ell,\omega} e^{i\omega s} e^{-i\omega t} S_\ell(\omega) \otimes \tilde{E}_\ell(t-s); \text{ para } S_\ell.
\end{aligned} \tag{124}$$

Sustituyendo lo anterior en (123)

$$\begin{aligned}
\dot{\hat{\rho}}_T &= \alpha^2 \text{Tr}_E \{ \\
&\quad \sum_{k,\omega,\ell,\omega'} \int_0^\infty ds e^{i\omega s} e^{i(\omega'-\omega)t} \left(S_\ell(\omega) \otimes \tilde{E}_\ell(t-s) \right) (\hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)) \left(S_k^\dagger(\omega') \otimes \tilde{E}_k^\dagger(t) \right) \\
&\quad - \sum_{k,\omega,\ell,\omega'} \int_0^\infty ds e^{i\omega s} e^{i(\omega'-\omega)t} \left(S_k^\dagger(\omega') \otimes \tilde{E}_k^\dagger(t) \right) \left(S_\ell(\omega) \otimes \tilde{E}_\ell(t-s) \right) (\hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_E(0)) \\
&\quad + h.c. \}.
\end{aligned}$$

(125)

Utilizando en la expresión anterior la propiedad $(A \otimes B)(C \otimes D)(E \otimes F) = ACE \otimes BDF$ y además $\text{Tr}(\sum_i A_i) = \sum_i \text{Tr}(A_i)$, obtenemos

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\rho}}_T &= \alpha^2 \sum_{k,\omega,\ell,\omega'} \{ \\ & \text{Tr}_E \left[\int_0^\infty ds e^{i\omega s} e^{i(\omega' - \omega)t} S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t) S_k^\dagger \otimes \tilde{E}_\ell(t-s) \hat{\rho}_E(0) \hat{E}_k^\dagger(t) \right] \\ & - \text{Tr}_E \left[\int_0^\infty ds e^{i\omega s} e^{i(\omega' - \omega)t} S_k^\dagger(\omega') S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t) \otimes \hat{E}_k^\dagger(t) \tilde{E}_\ell(t-s) \hat{\rho}_E(0) \right] \\ & + h.c. \}. \end{aligned} \quad (126)$$

La ecuación anterior puede reescribirse como,

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\rho}}(t) &= \sum_{\omega,\omega',k,\ell} \left(e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{k\ell}(\omega) \left[S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t), S_k^\dagger(\omega') \right] \right. \\ & \left. + e^{i(\omega - \omega')t} \Gamma_{\ell k}^*(\omega') \left[S_\ell(\omega), \hat{\rho}(t) S_k^\dagger(\omega') \right] \right), \end{aligned} \quad (127)$$

donde,

$$\Gamma_{k\ell}(\omega) = \int_0^\infty e^{i\omega s} ds \text{Tr}_E \left[\tilde{E}_k^\dagger(t) \tilde{E}_\ell(t-s) \rho_E(0) \right]. \quad (128)$$

A continuación expresamos a los operadores del entorno E del hamiltoniano de interacción en la RI,

$$\tilde{E}_\ell(t) = e^{-iH_E t} \hat{E}_\ell(t) e^{iH_E t}. \quad (129)$$

Utilizando la propiedad cíclica de la traza

$$\text{Tr}_E \left[\tilde{E}_k^\dagger(t) \tilde{E}_\ell(t-s) \rho_E(0) \right] = \text{Tr}_E \left[\hat{E}_k^\dagger(t) \hat{E}_\ell(t-s) \hat{\rho}_E(0) \right]. \quad (130)$$

Por lo tanto la ecuación (128) se escribe como,

$$\Gamma_{k\ell}(\omega) = \int_0^\infty e^{i\omega s} ds \text{Tr}_E \left[\hat{E}_k^\dagger(t) \hat{E}_\ell(t-s) \hat{\rho}_E(0) \right]. \quad (131)$$

Al considerar la dependencia del tiempo en la ecuación (127), concluimos que los términos con $|\omega - \omega'| \gg \alpha^2$ oscilarán mucho más rápido que la escala de tiempo típica

de la evolución del sistema. Por lo tanto, no contribuyen a la evolución del sistema. En el régimen de acoplamiento bajo ($\alpha \rightarrow 0$), podemos considerar que sólo los términos resonantes, $\omega = \omega'$, contribuyen a la dinámica y eliminan todos los demás. Aplicando esta aproximación a la ecuación (127) se reduce a

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = \sum_{k,\omega,\ell} \left\{ \Gamma_{k\ell}(\omega) \left[S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t), S_k^\dagger(\omega) \right] + h.c. \right\}. \quad (132)$$

Para dividir la dinámica en hamiltoniana y no hamiltoniana, ahora descomponemos los operadores $\Gamma_{k\ell}$ en partes hermitianas y no hermitianas, con

$$\Gamma_{k\ell}(\omega) = \frac{1}{2} \gamma_{k\ell}(\omega) + i\pi_{k\ell}; \quad (133)$$

$$\Gamma_{k\ell}^*(\omega) = \frac{1}{2} \gamma_{k\ell}(\omega) - i\pi_{k\ell}. \quad (134)$$

Si sumamos y restamos las ecuaciones (133) y (134)

$$\gamma_{k\ell}(\omega) = \Gamma_{k\ell}(\omega) + \Gamma_{\ell k}^*(\omega); \quad (135)$$

$$\pi_{k\ell} = \frac{-i}{2} [\Gamma_{k\ell}(\omega) - \Gamma_{\ell k}^*(\omega)]. \quad (136)$$

Si $\hat{\rho}_E(0)$ es un estado estacionario del ambiente E , esto es, $[H_E, \hat{\rho}_E(0)] = 0$ entonces

$$\text{Tr}_E \left[\hat{E}_k^\dagger(t) \hat{E}_\ell(t-s) \hat{\rho}_E(0) \right] = \text{Tr}_E \left[\hat{E}_k^\dagger(s) \hat{E}_\ell(s) \hat{\rho}_E(0) \right], \quad (137)$$

por lo que

$$\Gamma_{k\ell}(\omega) = \int_0^\infty e^{i\omega s} ds \text{Tr}_E \left[\hat{E}_k^\dagger(s) \hat{E}_\ell(s) \hat{\rho}_E(0) \right]. \quad (138)$$

Reescribiendo la ecuación (132) en términos de $\Gamma_{k\ell}$ y $\Pi_{k\ell}$

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = \sum_{k,\omega,\ell} \left\{ \left(\frac{1}{2} \gamma_{k\ell}(\omega) + i\Pi_{k\ell}(\omega) \right) \left[S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t), S_k^\dagger(\omega) \right] + \left(\frac{1}{2} \gamma_{k\ell}(\omega) - i\pi_{k\ell} \right) \left[S_\ell(\omega), \hat{\rho}(t) S_k^\dagger(\omega) \right] \right\}. \quad (139)$$

Factorizando términos se obtiene,

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\rho}} &= \sum_{k,w,\ell} i\Pi_{k\ell} \left(\left[S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t), S_k^\dagger(\omega) \right] - \left[S_\ell(\omega), \hat{\rho}(t) S_k^\dagger(\omega) \right] \right) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k,w,\ell} \gamma_{k\ell} \left(\left[S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t), S_k^\dagger(\omega) \right] + \left[S_\ell(\omega), \hat{\rho}(t) S_k^\dagger(\omega) \right] \right). \end{aligned} \quad (140)$$

Desarrollando los conmutadores de la ecuación anterior se obtiene

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\rho}} = & -i \left[\sum_{k,\omega,\ell} \Pi_{k\ell}(\omega) S_k^\dagger(\omega) S_\ell(\omega), \hat{\rho}(t) \right] + \\ & \sum_{k,\omega\ell} \gamma_{k\ell}(\omega) \left[S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t) S_{k(\omega)}^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ S_k^\dagger(\omega) S_\ell(\omega), \hat{\rho}(t) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (141)$$

La ecuación anterior puede escribirse en términos de H_{LS} que es una renormalización de la energía debido a la interacción con el entorno.

$$\dot{\hat{\rho}} = -i [H_{LS}, \hat{\rho}(t)] + \sum_{k,\omega\ell} \gamma_{k\ell}(\omega) \left[S_\ell(\omega) \hat{\rho}(t) S_{k(\omega)}^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ S_k^\dagger(\omega) S_\ell(\omega), \hat{\rho}(t) \right\} \right]. \quad (142)$$

A continuación transformamos la ecuación (142) a la representación de Schrödinger, recordando que,

$$\hat{\rho}(t) = e^{i(H+H_E)t} \rho(t) e^{-i(H+H_E)t}. \quad (143)$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}(\tau) = & -i [H + H_S, \rho(t)] + \\ & + \sum_{k,\omega,\ell} \gamma_{k\ell}(\omega) \left[e^{-iHt} S_\ell(\omega) e^{iHt} \rho(t) e^{-iHt} S_k^\dagger(\omega) e^{iHt} \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \left\{ e^{-iHt} S_k^\dagger(\omega) S_\ell(\omega) e^{iHt}, \rho(\tau) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (144)$$

Utilizando las ecuaciones (109), (108), (115) y (116), reescribimos la ecuación (144)

$$\dot{\rho}(t) = -i [H + H_s, \rho(t)] + \sum_{k,\omega,\ell} \gamma_{k\ell}(\omega) \left[S_\ell(\omega) \rho(t) S_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ S_k^\dagger S_\ell, \rho(t) \right\} \right]. \quad (145)$$

La ecuación (145) es la primera versión de la ecuación maestra markoviana, pero aún no está en la forma de Lindblad. Ésta también puede escribirse como,

$$\dot{\rho}(t) = -i [H + H_s, \rho(t)] + D[\rho(t)] \quad (146)$$

donde

$$D[\bullet] = \sum_{k,\omega,\ell} \gamma_{k\ell}(\omega) \left[S_\ell(\omega) \bullet S_k^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ S_k^\dagger(\omega) S_\ell(\omega), \bullet \right\} \right]. \quad (147)$$

Los coeficientes $\gamma_{k\ell}$ son positivos definidos. Se diagonaliza la matriz γ mediante una transformación unitaria, O , tal que,

$$O\gamma(\omega)O^\dagger = \begin{pmatrix} d_1(\omega) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2(\omega) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & d_N(\omega) \end{pmatrix}, \quad (148)$$

en donde,

$$d_i(\omega) = \sum_{k\ell} O_{ik}\gamma_{k\ell}(\omega)O_{i\ell}^*, \quad (149)$$

resultado que se demuestra a continuación.

Demostración:

Sea γ la matriz que puede diagonalizarse mediante una transformación unitaria O ,

$$O\gamma O^\dagger = \sum_{k',\ell'} O|k'\rangle \gamma_{k',\ell'} \langle \ell'| O^\dagger, \quad (150)$$

donde los elementos de matriz están dados por,

$$\langle i|O\gamma O^\dagger|i\rangle = \sum_{k',\ell'} O_{ik'}\gamma_{k'\ell'}O_{i\ell'}^*. \quad (151)$$

Por lo tanto

$$d_i(\omega) = \sum_{k\ell} O_{ik'}\gamma_{k'\ell'}(\omega)O_{i\ell'}^*. \quad (152)$$

despejando $\gamma_{k\ell}$,

$$\gamma_{k\ell} = \sum_i O_{ik}^* d_i O_{i\ell}. \quad (153)$$

Fin de la demostración.

Sustituyendo (153) en la ecuación (145)

$$\dot{\rho}(t) = -i[H + H_s, \rho(t)] + \sum_{k,\omega,\ell} \left[\sum_i O_{ik}^* d_i O_{i\ell}(\omega) \right] \left[S_\ell(\omega)\rho(t)S_k^\dagger - \frac{1}{2}\{S_k^\dagger S_\ell, \rho(t)\} \right], \quad (154)$$

y evaluando los términos de las sumas

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}(t) = & i [H + H_s, \rho(t)] + \sum_{i, \omega} \left(\underbrace{[\sqrt{d_i} \sum_l O_{iL} S_l]}_{L_i} \rho \underbrace{[\sqrt{d_i} \sum_k O_{ik}^* S_k^+]}_{L_i^\dagger} \right) \\
& - \sum_{i, 1\omega^2} \left[\underbrace{(\sqrt{d_i} \sum_k O_{ik}^* S_k^+)}_{L_i^\dagger} \underbrace{(\sqrt{d_i} \sum_l O_{iL} S_l)}_{L_i} \rho + \right. \\
& \left. \underbrace{\rho (\sqrt{d_i} \sum_k O_{ik}^* S_k^+)}_{L_i^\dagger} \underbrace{(\sqrt{d_i} \sum_l O_{iL} S_l)}_{L_i} \right]. \tag{155}
\end{aligned}$$

Por lo que finalmente se obtiene la ecuación de Lindblad-Gorini-Kossakovski-Sudarshan (Lindblad, 1976; Gorini *et al.*, 1976),

$$\dot{\rho}(t) = -i [H + H_s, \rho(t)] + \sum_{i, \omega} \left[L_i \rho(t) L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_i^\dagger L_i, \rho(t) \} \right], \tag{156}$$

en donde se ha definido a los operadores de salto como,

$$L_i = \sqrt{d_i(\omega)} \sum_i O_{iL} S_L(\omega). \tag{157}$$

En el caso más simple, sólo tendremos una frecuencia dominante ω y la ecuación se puede simplificar aún más, por lo que la ecuación (156) se escribe cómo,

$$\dot{\rho}(t) = -i [H + H_s, \rho(t)] + \sum_i \left[L_i \rho(t) L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_i^\dagger L_i, \rho(t) \} \right]. \tag{158}$$

A continuación se presenta un resumen de las diferentes aproximaciones utilizadas.

La primera aproximación es una consecuencia de la suposición de acoplamiento débil que nos permite expandir la ecuación exacta de movimiento de la matriz de densidad a

segundo orden. Junto con la condición $\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_B$ esto conduce a la aproximación de Born a la ecuación maestra. La segunda aproximación es la aproximación de Markov en la que la ecuación maestra cuántica se hace local en el tiempo reemplazando la matriz de densidad $\rho_S(s)$ en el tiempo retardado S con la del tiempo presente $\rho_S(t)$. Además, el límite de integración se lleva al infinito para obtener la aproximación de Born-Markov de la ecuación maestra. La condición física relevante para la aproximación de Born-Markov es que el tiempo de correlación del baño τ_B es pequeño comparado con el tiempo de relajación del sistema, es decir $\tau_B < \tau_R$.

Finalmente, en la RWA, los términos rápidamente oscilantes proporcionales a $e^{i(\omega' - \omega)t}$ para $\omega' \neq \omega$ se desprecian, asegurando que la ecuación maestra cuántica está en la forma de Lindblad. La condición correspondiente es que las diferencias de frecuencia inversa involucradas en el problema sean pequeñas en comparación con el tiempo de relajación del sistema, es decir, $\tau_S \approx |\omega - \omega'|^{-1} w \ll \tau_R$.