



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física

Teoría general de los motores cuánticos lineales

Tesis presentada para optar por el título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área Ciencias Físicas

por *Milton Emiliano Aguilar*

Director de Tesis: *Juan Pablo Paz*
Consejero de Estudios: *Esteban Calzetta*
Lugar de Trabajo: Departamento de Física, FCEyN, UBA

Ciudad Autónoma de Buenos Aires
2022

Teoría general de los motores cuánticos lineales

Resumen

En este trabajo presentamos una teoría general y exacta para la clase de motores cuánticos lineales. La sustancia motora de estas máquinas es una red de osciladores sometidos a un potencial externo periódico, de la que se puede extraer trabajo útil. Acoplados a esta red, hay varios entornos bosónicos que cumplen el papel de reservorios, intercambiando calor con la sustancia motora, y pueden o no ser térmicos. El modelo matemático utilizado se puede resolver exactamente, sin la necesidad de recurrir a aproximaciones comúnmente utilizadas en la literatura, como por ejemplo dinámica Markoviana, reservorios estáticos, o acoplamiento débil.

La primera parte de esta tesis es un estudio completo de la termodinámica de los motores cuánticos lineales. Enunciamos la primera y segunda ley de la termodinámica, analizando en profundidad los procesos fundamentales que permiten el intercambio de calor entre la sustancia motora y los reservorios y, en última instancia, son los encargados de producir trabajo. Concluimos demostrando una cota generalizada para la eficiencia de estos motores al estilo de la de Carnot, que solo depende de los reservorios utilizados y no de la sustancia motora o del ciclo termodinámico que se está realizando, y mostramos que coincide con ésta cuando los reservorios son térmicos, y que puede ser mayor cuando no lo son.

En la segunda parte de la tesis nos enfocamos en el efecto producido por los procesos fundamentales nombrados anteriormente en los reservorios, a tiempos largos. Mostramos que, en ese límite, hay una producción constante de correlaciones clásicas y cuánticas, incluido entrelazamiento, entre distintas partes de los reservorios. Además, analizamos el efecto que tienen las agitaciones térmicas sobre estas correlaciones, observando que hay algunas más robustas que otras.

Palabras clave: motores cuánticos, máquinas térmicas cuánticas, termodinámica cuántica, información cuántica, sistemas cuánticos abiertos.

General theory for quantum linear engines

Abstract

In this work we present an exact general theory for the class of linear quantum engines. The working substance of this type of machines is a network of periodically driven oscillators. Coupled to this network there is an arbitrary amount of bosonic environments that play the role of reservoirs, which can be thermal or nonthermal. The mathematical model we use to describe the engine can be exactly solved, without the need of the usual approximations found in the literature such as Markovianity, static reservoirs or weak coupling.

The first part of this thesis is a complete study of the thermodynamics of linear quantum engines. We state the first and second law of thermodynamics, with a deep analysis of the fundamental processes that enable the exchange of heat between the working substance and the reservoirs and, eventually, generate work that can be later extracted. We conclude by proving a generalized Carnot-like bound for the efficiency of these engines that only depends on the type of reservoirs used and not on the working substance or the thermodynamic cycle the engine is performing. We show that this generalized bound coincides with the Carnot efficiency when the reservoirs are thermal ones, and that it can be higher when they are not.

In the second part of this thesis we will focus our attention on the effect the fundamental processes mentioned above have on the reservoirs in the long time regime. We will show that, in this limit, there is a continuous production of classical and quantum correlations, including entanglement, between different parts of the reservoirs. Additionally, we will analyze the effect of the thermal agitations on these correlations, showing that there are some more robust than others.

Keywords: quantum engines, quantum heat machines, quantum thermodynamics, quantum information, quantum open systems.

Índice general

1	Introducción	7
2	El modelo y sus propiedades	10
2.1	Hamiltoniano y ecuaciones de movimiento	11
2.2	Soluciones a las ecuaciones de movimiento	12
2.2.1	Operadores posición del entorno	12
2.2.2	Operadores posición del sistema	13
2.2.3	Potencial periódico	14
2.3	Propiedades de la función de Green G	16
2.3.1	Conjugación	16
2.3.2	Traslación del argumento	16
2.3.3	Parte imaginaria de la función de Green estática	18
2.3.4	Comportamiento a tiempos largos	19
2.4	Entornos continuos y los límites del modelo	19
2.5	Estado asintótico del sistema	22
2.6	Resumen	26
3	Termodinámica de los motores cuánticos lineales	28
3.1	El modelo como motor cuántico	28
3.2	Primera ley de la termodinámica	31
3.2.1	Definiciones de calor, trabajo y energía interna	31
3.2.2	Promedio temporal	32
3.2.3	Análisis del calor intercambiado	33
3.2.3.1	Término estático	34
3.2.3.2	Término resonante	34
3.2.3.3	Término no resonante	36
3.2.4	Trabajo y eficiencia	37
3.3	Segunda ley de la termodinámica	39
3.3.1	Enunciado de Kelvin-Planck	39
3.3.2	Desigualdad de Clausius generalizada	40
3.3.2.1	Temperatura local	41
3.3.2.2	Demostración de la desigualdad de Clausius	44
3.3.3	Equivalencia entre el enunciado de Kelvin-Planck y la desigualdad de Clausius	46
3.4	Cota generalizada para la eficiencia de los motores lineales	47
3.5	Costo de preparar reservorios no térmicos	49
3.6	¿Y dónde está lo cuántico?	51

4	Generación de correlaciones clásicas y cuánticas en los reservorios	55
4.1	Granulado de los reservorios	56
4.2	Elementos de información cuántica para estados Gaussianos	57
4.2.1	Información mutua	58
4.2.2	Discordia cuántica	59
4.2.3	Negatividad logarítmica	61
4.3	Matriz de covariancia a tiempos largos	61
4.3.1	Autovalores simplécticos	64
4.4	Estudio de las correlaciones	65
4.4.1	Información mutua	66
4.4.2	Discordia cuántica	68
4.4.3	Negatividad logarítmica	69
5	Resumen y conclusiones	74
A	Calor intercambiado por cada reservorio	77
A.1	Descomposición en procesos elementales	82
A.2	Propiedades de las tasas de transición y emisión	86
B	Matriz de covariancia	88
B.1	Elementos de la matriz de covariancia	88
B.2	Comportamiento a tiempos largos	97
B.3	Invariantes simplécticos	106
B.4	Autovalores simplécticos	108
B.5	Medidas de correlación	111

Capítulo 1

Introducción

Las tecnologías cuánticas emergentes, como la computación cuántica [1], la criptografía cuántica [2] y la metrología cuántica [3], dominaron la investigación sobre la mecánica cuántica en las últimas décadas, y prometen ser el futuro del procesamiento y la transmisión de información. Los dispositivos que surjan como resultado, así como sus contrapartes clásicas, van a necesitar fuentes de energía y control térmico preciso para aumentar su fiabilidad e impedir fallos prematuros. Debido a su naturaleza microscópica e interesantes características [4], las máquinas térmicas cuánticas, como los motores, refrigeradores y aceleradores, son la opción obvia para cumplir ese rol. Por lo tanto, es una absoluta necesidad lograr un profundo entendimiento de su funcionamiento y propiedades si es que queremos aprovechar todo su potencial. En este trabajo vamos a presentar una teoría general y exacta de la dinámica y termodinámica de los motores cuánticos lineales, que explica su funcionamiento en términos de procesos fundamentales, cuantifica la energía que se pierde sin ser transformada en trabajo y establece una cota para su eficiencia máxima. Además, vamos a estudiar la generación y naturaleza de las correlaciones que se forman dentro y entre los reservorios para entender qué es lo que sucede en ellos mientras el motor está en funcionamiento.

Desde del inicio de la Revolución Industrial, de la cual la máquina a vapor de James Watt fue la principal fuerza impulsora, el desarrollo de la termodinámica se centró en los motores térmicos [5]: máquinas con la capacidad de transformar energía desordenada, o calor, en trabajo mecánico útil. Hoy en día constituyen los cimientos sobre los cuales reposa la sociedad moderna: no solo son usados por generadores para producir la mayoría de la electricidad del mundo [6], sino que también son la fuente de poder más común para vehículos terrestres, marítimos y aéreos [7]. Por lo tanto, no es sorprendente que mucho esfuerzo se haya dedicado a su perfeccionamiento. Idealmente, un motor debería operar cerca de su eficiencia teórica máxima y tener una gran potencia con, a lo sumo, pequeñas fluctuaciones. Desafortunadamente, se sabe que solo dos de estos tres requerimientos son mutuamente compatibles [8, 9]. Peor aun, si bien es un hecho establecido que la eficiencia de los motores térmicos tiene un límite teórico máximo dado por la eficiencia de Carnot [10], en la práctica la eficiencia de motores reales está muy por debajo de ésta (un límite más realista es la eficiencia endoreversible de Curzon-Ahlborn [11], que tiene en cuenta la irreversibilidad de la transferencia de calor desde un reservorio térmico hacia la sustancia motora y viceversa).

La llegada de la termodinámica cuántica [12, 13, 14] abrió las puertas a una clase completamente nueva de motores que se comportan siguiendo las leyes de la mecánica cuántica

ca. Por ejemplo, motores cuya sustancia de trabajo consiste de un sistema de pocos niveles [15, 16, 17] o de un solo átomo [18], motores acoplados a reservorios no térmicos que aparentan alcanzar eficiencias mayores a las de Carnot [19, 20], o motores que funcionan incluso sin ningún reservorio y el trabajo es extraído mediante mediciones [21]. No solo nuevos tipos de motores fueron explorados, sino que la influencia de distintos efectos puramente cuánticos también fue ampliamente estudiada. Se sabe que el entrelazamiento, *el* rasgo característico de la mecánica cuántica y recurso esencial en varias tecnologías cuánticas, puede ser utilizado como combustible en motores basados en mediciones [22]. La coherencia cuántica, que es la propiedad que poseen los sistemas que se encuentran en una superposición de estados, puede mejorar la extracción de trabajo e incluso permitir que éste sea extraído de motores acoplados a un solo reservorio [23]. Sin embargo, curiosamente, no hay una conexión universal entre la presencia de correlaciones cuánticas y el rendimiento de los motores cuánticos [24].

Los motores cuánticos no son un mero ejercicio teórico. Ya hace más de sesenta años que Scovil y Schultz-DuBois se dieron cuenta que el funcionamiento del máser, el predecesor directo del láser [25], se podía explicar modelándolo como un motor cuántico cuya sustancia de trabajo es un sistema de tres niveles [26]. Remarcablemente, este modelo sencillo ofrece una descripción realista de máseres experimentalmente realizables. Desde ese momento muchos motores cuánticos fueron construidos en laboratorios utilizando varias plataformas distintas. Probablemente el ejemplo más conocido sea el motor térmico que opera con una sustancia de trabajo formada por un único átomo atrapado en una trampa de iones [27, 28]. Los autores de las Refs. [27, 28] diseñaron un reservorio térmico frío y uno caliente utilizando enfriamiento láser y ruido de un campo eléctrico, respectivamente, e indujeron al ion a realizar un ciclo similar al de Stirling. Una trampa de iones también fue la plataforma elegida para construir un motor conformado por un único spin acoplado a un volante de inercia que almacena el trabajo producido por éste [29]. Otra plataforma de interés son los sistemas micro y nano electromecánicos (MEMS y NEMS por sus siglas en inglés, respectivamente) donde, por ejemplo, se construyó un motor formado por una nano viga vibratoria de $18,8\ \mu\text{m}$ de largo que realizaba el ciclo Otto y estaba acoplado a reservorios *squeezados*, alcanzando una eficiencia aparente mayor a la de Carnot [30]. Debido a su relativamente bajo costo y excelente controlabilidad, la resonancia magnética nuclear (NMR, por sus siglas en inglés) resulta una plataforma atractiva para la experimentación con motores cuánticos. En ella se logró implementar un motor que funciona con un reservorio a una temperatura efectiva negativa [31], y un motor que trabaja casi a su máxima eficiencia teórica [32]. Los centros de nitrógeno-vacante son una plataforma fundamentalmente distinta a las anteriores que ofrece gran versatilidad y controlabilidad [33]. En ellos se implementaron dos tipos de motores que demostraron por primera vez efectos cuánticos genuinos debido a la coherencia presente en la sustancia motora [34]. Otros ejemplos de plataformas comúnmente utilizadas son los átomos ultra fríos [35] y los transistores de efecto túnel [36].

A pesar del extensivo estudio teórico y múltiples realizaciones experimentales, es sorprendente que, contrariamente a lo que sucede con la termodinámica clásica, aún no se haya propuesto una teoría general y exacta para describir a los motores cuánticos. Sin embargo, sí es cierto que hay teorías bastante generales desarrolladas bajo ciertas hipótesis, ciclos termodinámicos particulares, o sistemas específicos [37, 38, 39, 40]. Este trabajo pretende ser un primer paso en esa dirección: vamos a presentar una teoría general y exacta para la clase de motores cuánticos lineales, que son motores cuya sustancia de trabajo es

una red arbitraria de osciladores sometidos a un potencial externo periódico y acoplada a varios reservorios. Por *general* nos referimos a que no vamos a suponer ninguna estructura particular para la red que compone a la sustancia de trabajo, o el tipo de reservorios a los que ésta está acoplada, o el ciclo termodinámico que esté ejecutando; y *exacta* quiere decir que no vamos a realizar absolutamente ninguna aproximación. Además, aprovechando que nuestro enfoque tiene en cuenta la dinámica completa no Markoviana de los reservorios, vamos a hacer un estudio completo del tipo y naturaleza de las correlaciones que se generan dentro de ellos, para así poder entender más en profundidad su rol en el funcionamiento del motor, que es un aspecto que muchas veces se deja de lado en la literatura.

El cuerpo de esta tesis se divide en tres capítulos. En el **Capítulo 2** vamos a mostrar y resolver el modelo matemático que posteriormente utilizaremos para describir el motor cuántico. No sólo lo vamos a resolver, sino que también vamos a explorar varias de sus propiedades y su comportamiento a tiempos largos. Mostraremos que, bajo ciertas hipótesis razonables sobre los reservorios, la sustancia motora presenta un régimen estacionario estable en el que se comporta de forma cíclica, análogamente a un motor clásico. En el **Capítulo 3** vamos a presentar una teoría termodinámica completa para la clase de motores cuánticos lineales. Comenzaremos enunciando la primera ley de la termodinámica, que relaciona el trabajo producido por la sustancia motora con el calor intercambiado por los reservorios, y estudiaremos los procesos fundamentales encargados de realizar este intercambio. Vamos a mostrar que sólo hay dos de ellos: el transporte de excitaciones de un reservorio a otro, que llamaremos *procesos resonantes*, y la creación de un par de excitaciones a partir de un paquete de energía cedido por el potencial externo, que llamaremos *procesos no resonantes*. Luego pasaremos a la segunda ley de la termodinámica, donde mostraremos una generalización del enunciado de Kelvin-Planck y de la desigualdad de Clausius, y vamos a discutir la equivalencia entre ellos. A continuación utilizaremos la desigualdad de Clausius para mostrar que la eficiencia de los motores cuánticos lineales está acotada por una eficiencia máxima análoga a la de Carnot, pero para tipos de reservorios más generales que solo térmicos. Sorprendentemente, este resultado nos va a permitir realizar una estimación del costo energético necesario para preparar reservorios en estados no térmicos, que permiten alcanzar eficiencias mayores a las de Carnot y, en particular, estudiaremos la preparación de reservorios térmicos *squeezeados*. Finalizaremos el capítulo con una discusión sobre los aspectos clásicos y cuánticos de los motores cuánticos lineales. En el **Capítulo 4** vamos a estudiar en detalle la generación y naturaleza de las correlaciones que existen en el estado estacionario (es decir, en el límite de tiempos largos) dentro y entre los reservorios. Mostraremos que los mismos procesos que intercambian calor, los resonantes y los no resonantes, son los únicos dos que las generan, y que ambos producen correlaciones clásicas y cuánticas. Además, veremos que solo los no resonantes producen entrelazamiento. Culminaremos este trabajo en el **Capítulo 5** con un breve resumen de los resultados más importantes y las conclusiones finales.

Parte del material contenido en los capítulos que conforman esta tesis ha sido publicado en tres trabajos. El **Capítulo 3** está basado en el trabajo *General theory for thermal and nonthermal quantum linear engines* (M. Aguilar y J. P. Paz, 2022) [41]. El **Capítulo 4**, en los trabajos *Entanglement generation in quantum thermal machines* (M. Aguilar, N. Freitas, y J. P. Paz, 2020) [42] y *Time-extensive classical and quantum correlations in thermal machines* (M. Aguilar y J. P. Paz, 2022) [43]. Además, algunas secciones del **Capítulo 2** están incluidas en los apéndices de los trabajos mencionados anteriormente.

Capítulo 2

El modelo y sus propiedades

En este capítulo vamos a presentar y resolver exactamente el modelo matemático que vamos a utilizar en el **Capítulo 3** para describir a los motores cuánticos lineales. Éste es una generalización del modelo arquetípico de movimiento Browniano cuántico de Caldeira y Legget [44, 45], al que se le agregan más partículas o grados de libertad al sistema, un potencial externo periódico y se le da la posibilidad a los entornos de tener otros estados iniciales que no sean térmicos. El caso estático (es decir, con un potencial externo constante) fue presentado y resuelto en la Ref. [46], y el caso con potencial externo periódico y reservorios térmicos fue analizado, en el límite de tiempos largos, en las Refs. [47, 48]. A continuación vamos a resolver el problema general para todo tiempo, demostrando nuevas propiedades y cerrando cabos sueltos que habían quedado en trabajos anteriores.

La idea de modelar un motor cuántico como un sistema cuántico abierto proviene originalmente de Alicki [49], y sigue siendo la forma predominante hoy en día [50]. Lo particular de nuestro tratamiento es que permite resolver el modelo de forma exacta sin recurrir a las aproximaciones usuales, como Markovianidad, reservorios estáticos y en equilibrio o acoplamiento débil. De hecho, aprovechando ésto, vamos a hacer un especial énfasis en la dinámica de los reservorios pues van a ser el objeto de estudio del **Capítulo 4**.

Vamos a comenzar planteando y resolviendo las ecuaciones de movimiento del sistema y del entorno. Para ello, vamos a utilizar el método de funciones de Green. Luego, vamos a estudiar ciertas propiedades de estas soluciones que nos van a ayudar a realizar los cálculos necesarios para los siguientes capítulos. Continuamos con una discusión sobre la diferencia entre entornos discretos y continuos, mostrando que estos últimos inducen disipación en el sistema. Finalmente, vamos a demostrar explícitamente que el sistema alcanza un estado asintótico estable que es periódico con la misma periodicidad que el potencial externo (conocido en la teoría de sistemas dinámicos como *ciclo límite*).

Este capítulo es muy técnico y puede resultar exhaustivo para una primera lectura. Por ello, al final de éste incluiremos un resumen donde resaltaremos los resultados más importantes y necesarios para comprender los capítulos siguientes. la persona que lo desee puede saltarse el resto y leer solo dicho resumen en la **Sección 2.6**.

2.1 Hamiltoniano y ecuaciones de movimiento

Consideremos un sistema al que llamaremos \mathcal{S} , formado por una red de N_S osciladores sometidos a un potencial externo periódico dependiente del tiempo $V(t)$. Acoplado a \mathcal{S} se encuentra un entorno \mathcal{E} , compuesto por distintas partes \mathcal{E}_α , cada una de ellas formada por N_α osciladores armónicos desacoplados. Las distintas partes \mathcal{E}_α se distinguen entre ellas por el número de osciladores N_α y por su estado inicial ρ_α^0 , que es completamente arbitrario. Momentáneamente vamos a considerar que los \mathcal{E}_α están formados por una cantidad discreta de osciladores, pero luego vamos a pasar al límite continuo (la diferencia entre entornos discretos y continuos está discutida en la **Sección 2.4**). En la Fig. 2.1 se muestra un esquema del modelo utilizado en el caso particular de dos reservorios.

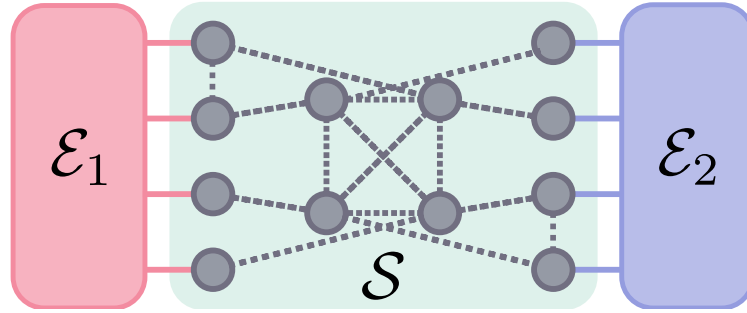


Figura 2.1: Una red \mathcal{S} de $N_S = 16$ osciladores acoplada a un entorno dividido en dos partes, \mathcal{E}_1 y \mathcal{E}_2 . Las líneas punteadas representan a los acoplamientos entre los osciladores de \mathcal{S} , contenidos en los elementos extradiagonales de $V(t)$, y las líneas continuas representan a los acoplamientos entre \mathcal{S} y \mathcal{E}_1 , contenidos en C_1 , y entre \mathcal{S} y \mathcal{E}_2 , contenidos en C_2 .

La dinámica global está regida por el Hamiltoniano

$$H(t) = H_S(t) + H_{\mathcal{E}} + H_{S\mathcal{E}}, \quad (2.1)$$

donde H_S es el Hamiltoniano correspondiente a \mathcal{S} ,

$$H_S(t) = P^T M^{-1} P / 2 + X^T V(t) X / 2, \quad (2.2)$$

$H_{\mathcal{E}}$ el Hamiltoniano del entorno,

$$H_{\mathcal{E}} = \sum_{\alpha} H_{\mathcal{E}_\alpha} = \sum_{\alpha} p_{\alpha}^T m_{\alpha}^{-1} p_{\alpha} / 2 + q_{\alpha}^T m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha} / 2, \quad (2.3)$$

con H_{α} el Hamiltoniano correspondiente a cada \mathcal{E}_α , y $H_{S\mathcal{E}}$ es el Hamiltoniano de interacción,

$$H_{S\mathcal{E}} = \sum_{\alpha} H_{S\mathcal{E}_\alpha} = \sum_{\alpha} X^T C_{\alpha} q_{\alpha}. \quad (2.4)$$

Arriba, $X^T = (X_1, X_2, \dots, X_{N_S})$ y $P^T = (P_1, P_2, \dots, P_{N_S})$ son vectores que contienen los operadores posición y momento de cada oscilador de \mathcal{S} , respectivamente, y M y $V(t)$ son matrices reales y simétricas de dimensión $N_S \times N_S$, no necesariamente diagonales. Análogamente, $q_{\alpha}^T = (q_{\alpha,1}, q_{\alpha,2}, \dots, q_{\alpha,N_{\alpha}})$ y $p_{\alpha}^T = (p_{\alpha,1}, p_{\alpha,2}, \dots, p_{\alpha,N_{\alpha}})$ son vectores que contienen los operadores posición y momento de cada oscilador de \mathcal{E}_α , respectivamente, y m_{α} y ω_{α} son matrices

reales y diagonales de dimensión $N_\alpha \times N_\alpha$, cuyos elementos corresponden a las masas y frecuencias de cada uno de ellos. Las constantes de acoplamiento entre los osciladores de \mathcal{S} y los de cada \mathcal{E}_α se encuentran contenidas en las matrices reales C_α de dimensión $N_S \times N_\alpha$.

Vamos a analizar la dinámica del modelo utilizando la representación de Heisenberg, donde los estados iniciales son estacionarios y los operadores evolucionan en el tiempo de acuerdo a la ecuación

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{1}{i\hbar}[A(t), H(t)] + \frac{\partial}{\partial t}A(t), \quad (2.5)$$

para cualquier operador $A(t)$. Si A no depende explícitamente del tiempo en la representación de Schrödinger, el último término del lado derecho de la Ec. (2.5) es nulo (i.e., $\partial_t A(t) = 0$). Entonces, para los operadores de \mathcal{S} tenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \dot{X} &= M^{-1}P \\ \dot{P} &= -V(t)X - \sum_{\alpha} C_{\alpha}q_{\alpha} \end{aligned} \quad (2.6)$$

y, para los de \mathcal{E}_α ,

$$\begin{aligned} \dot{q}_{\alpha} &= m_{\alpha}^{-1}p_{\alpha} \\ \dot{p}_{\alpha} &= -m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2q_{\alpha} - C_{\alpha}^T X \end{aligned} \quad (2.7)$$

Los sistemas de ecuaciones (2.6) y (2.7) se pueden transformar en dos ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden derivando las primeras y reemplazando \dot{P} y \dot{p}_{α} , respectivamente, en las segundas. Realizando ésto, llegamos al sistema de ecuaciones acopladas con el que vamos a trabajar a continuación:

$$\boxed{\begin{aligned} M\ddot{X} + V(t)X &= -\sum_{\alpha} C_{\alpha}q_{\alpha} \\ \ddot{q}_{\alpha} + \omega_{\alpha}^2q_{\alpha} &= -C_{\alpha}^T X \end{aligned}} \quad (2.8)$$

2.2 Soluciones a las ecuaciones de movimiento

En esta sección vamos a resolver el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas mostrado en la Ec. (2.8) y a encontrar explícitamente a los operadores posición $X(t)$ y $q_{\alpha}(t)$. La dinámica de los operadores momento $P(t)$ y $p_{\alpha}(t)$ se recupera utilizando la primera de las ecuaciones en los sistemas (2.6) y (2.7). Es decir, derivando el respectivo operador posición y multiplicándolo por M o m_{α} , según corresponda.

2.2.1 Operadores posición del entorno

Vamos a comenzar con la segunda de las ecuaciones del sistema mostrado en la Ec. (2.8):

$$\ddot{q}_{\alpha} + \omega_{\alpha}^2q_{\alpha} = -C_{\alpha}^T X. \quad (2.9)$$

Por ser una ecuación diferencial lineal inhomogénea, la solución completa de la Ec. (2.9) es la suma de la solución homogénea y la particular. La solución homogénea, $q_{\alpha}^h(t)$, es

$$q_{\alpha}^h(t) = \cos(\omega_{\alpha}t)q_{\alpha}^0 + (m_{\alpha}\omega_{\alpha})^{-1}\sin(\omega_{\alpha}t)p_{\alpha}^0, \quad (2.10)$$

donde q_α^0 y p_α^0 son la colección de operadores posición y momento de los osciladores de \mathcal{E}_α en la representación de Schrödinger, mientras que la particular, $q_\alpha^p(t)$, es

$$q_\alpha^p(t) = -(m_\alpha \omega_\alpha)^{-1} \int_0^t dt' \sin[\omega_\alpha(t-t')] C_\alpha^T X(t'). \quad (2.11)$$

Por lo tanto, la solución de la Ec. (2.9) es

$$\boxed{q_\alpha(t) = \cos(\omega_\alpha t) q_\alpha^0 + (m_\alpha \omega_\alpha)^{-1} \sin(\omega_\alpha t) p_\alpha^0 - (m_\alpha \omega_\alpha)^{-1} \int_0^t dt' \sin[\omega_\alpha(t-t')] C_\alpha^T X(t').} \quad (2.12)$$

Notamos que la solución presentada en la Ec. (2.12) aún no está completa pues falta conocer $X(t)$.

2.2.2 Operadores posición del sistema

Ahora, para $X(t)$, continuamos con la primera de las ecuaciones en la Ec. (2.8):

$$M\ddot{X} + V(t)X = -\sum_\alpha C_\alpha q_\alpha. \quad (2.13)$$

El primer paso para resolver la Ec. (2.13) es reemplazar $q_\alpha(t)$ en el lado derecho por la solución encontrada en la Ec. (2.12):

$$M\ddot{X} + V(t)X - \int_0^t dt' \left[\sum_\alpha C_\alpha (m_\alpha \omega_\alpha)^{-1} \sin[\omega_\alpha(t-t')] C_\alpha^T \right] X(t') = -\sum_\alpha C_\alpha q_\alpha^h(t) \quad (2.14)$$

La Ec. (2.14) es una ecuación inhomogénea integro-diferencial lineal de segundo orden y para resolverla vamos a utilizar el método de funciones de Green. En particular nos va a interesar el propagador retardado $G = G(t, t')$, que es la única solución de

$$\begin{aligned} M \frac{\partial^2}{\partial t^2} G(t, t') + V(t)G(t, t') \\ - \int_0^t d\tau \left[\sum_\alpha C_\alpha (m_\alpha \omega_\alpha)^{-1} \sin[\omega_\alpha(t-\tau)] C_\alpha^T \right] G(\tau, t') = \mathbb{1}_{N_S} \delta(t-t') \end{aligned} \quad (2.15)$$

con condiciones iniciales $G(t, t') = 0$ para $t \leq t'$, y $\partial_t G(t^-, t') = 0$ y $\partial_t G(t^+, t') = M^{-1}$ (la derivada es discontinua en $t = t'$). A efectos prácticos es conveniente avanzar un poco más con la Ec. (2.15) y realizar una integración parcial en el último sumando del lado izquierdo. De esta forma, llegamos a

$$M \frac{\partial^2}{\partial t^2} G(t, t') + V_R(t)G(t, t') - \int_0^t d\tau \gamma(t-\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} G(\tau, t') = \mathbb{1}_{N_S} \delta(t-t'), \quad (2.16)$$

donde definimos el núcleo de disipación

$$\gamma(t) = \sum_\alpha \int_0^\infty d\omega \frac{I_\alpha(\omega)}{\omega} \cos(\omega t), \quad (2.17)$$

con

$$I_\alpha(\omega) = \frac{1}{m\omega} C_\alpha \delta(\omega - \omega_\alpha) C_\alpha^T \quad (2.18)$$

la densidad espectral correspondiente a cada \mathcal{E}_α (notar que ahora m es una función de ω , de tal forma que $m(\omega_{\alpha,i}) = m_{\alpha,i}$), y el potencial renormalizado $V_R(t) = V(t) - \gamma(0)$. Una vez conocida G , la solución de la Ec. (2.14) se escribe como

$$X(t) = X^h(t) - \int_0^t dt' G(t, t') \left[\sum_\alpha C_\alpha q_\alpha^h(t') \right], \quad (2.19)$$

donde X^h es la solución homogénea de la Ec. (2.14), que es una combinación lineal de X_0 y P_0 , la colección de operadores posición y momento de los osciladores en \mathcal{S} en la representación de Schrödinger, respectivamente. Más adelante veremos que no interesa la forma particular de X^h . La solución mostrada en la Ec. (2.19) es exacta y tiene en cuenta el efecto completo del entorno sobre el sistema (incluida la disipación, si es que consideramos un entorno continuo en vez de uno discreto).

2.2.3 Potencial periódico

En el caso en que el potencial $V(t)$ sea periódico se puede encontrar la forma explícita de la función de Green G , que recordamos que es la solución de la Ec. (2.16). Para ello vamos a recurrir a la transformada de Laplace. Entonces, tomamos la Ec. (2.16), la multiplicamos a ambos lados por e^{-st} e integramos en la variable t entre cero e infinito:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dt \left[M \frac{\partial^2}{\partial t^2} G(t, t') + V_R(t) G(t, t') - \int_0^t dt' \gamma(t-t') \frac{\partial}{\partial t'} G(t, t') \right] e^{-st} \\ &= \mathbb{1}_{N_S} \int_0^\infty dt \delta(t-t') e^{-st}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Un cálculo directo nos conduce a

$$\begin{aligned} & [Ms^2 + s\tilde{\gamma}(s)] \int_0^\infty dt G(t, t') e^{-s(t-t')} + \int_0^\infty dt V_R(t) G(t, t') e^{-s(t-t')} \\ &= \mathbb{1}_{N_S} \left[sG(0, t') + \frac{\partial}{\partial t} G(0, t') \right] e^{st'}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

donde $\tilde{\gamma}$ es la transformada de Laplace del núcleo de disipación γ , definido previamente en la Ec. (2.17). Debido a las condiciones iniciales de G ($G(t, t') = 0$ para $t \leq t'$, y $\partial_t G(t^-, t') = 0$), el segundo sumando del lado derecho de la Ec. (2.21) se anula y la Ec. (2.21) se simplifica a:

$$[Ms^2 + s\tilde{\gamma}(s)] \int_0^\infty dt G(t, t') e^{-s(t-t')} + \int_0^\infty dt V_R(t) G(t, t') e^{-s(t-t')} = \mathbb{1}_{N_S}. \quad (2.22)$$

Ahora hacemos uso de la periodicidad de $V(t)$. Vamos a suponer que tiene una descomposición en serie de Fourier de la forma

$$V(t) = \sum_n V_n e^{in\omega_d t}, \quad (2.23)$$

con $\omega_d = 2\pi/\tau_d$ y τ_d su período de oscilación, y proponemos como *ansatz*

$$\boxed{G(t, t') = \sum_n A_n(t - t') e^{in\omega_d t}}, \quad (2.24)$$

donde los coeficientes A_n se anulan para argumentos negativos (es decir, $A_n(t < 0) = 0$) para cumplir con las condiciones iniciales de G y, además, $A_n \rightarrow 0$ cuando $|n| \rightarrow \infty$ (si no, la expansión en la Ec. (2.24) no tendría sentido). De esta forma, el problema de encontrar G se reduce a encontrar sus coeficientes A_n . Insertando las Ecs. (2.23) y (2.24) en la Ec. (2.22) y reordenando las sumas obtenemos

$$\sum_k \left\{ [M(s^2 + \omega_r^2) + s\tilde{\gamma}(s)] \int_0^\infty dt A_n(t) e^{-(s-ik\omega_d)t} + \sum_{n \neq 0} V_n \int_0^\infty dt A_{k-n}(t) e^{-(s-ik\omega_d)t} \right\} e^{ik\omega_d t'} = \mathbb{1}_{N_S}, \quad (2.25)$$

donde $\omega_r^2 = M^{-1}[V_0 - \gamma(0)] > 0$ es la frecuencia renormalizada. Notamos que las integrales en la Ec. (2.25) son las transformadas de Laplace de los coeficientes A_n , \tilde{A}_n , pero evaluadas en un argumento complejo. Entonces, escribimos

$$\sum_k \left[\tilde{g}^{-1}(s) \tilde{A}_k(s - ik\omega_d) + \sum_{n \neq 0} V_n \tilde{A}_{k-n}(s - ik\omega_d) \right] e^{ik\omega_d t'} = \mathbb{1}_{N_S}, \quad (2.26)$$

con $\tilde{g}(s) = [M(s^2 + \omega_r^2) + s\tilde{\gamma}(s)]^{-1}$ la transformada de Laplace de la función de Green $g(t - t')$ del problema estático (es decir, con $V(t) = V_0$). Por unicidad de la transformada de Fourier, podemos argumentar que el único término distinto de cero de la Ec. (2.26) es el que tiene $k = 0$. Luego de un cambio de variables, finalmente llegamos a

$$\boxed{\tilde{g}^{-1}(s + ik\omega_d) \tilde{A}_k(s) + \sum_{n \neq 0} V_n \tilde{A}_{k-n}(s) = \mathbb{1}_{N_S} \delta_{k,0}}. \quad (2.27)$$

La Ec. (2.27) es un sistema lineal de ecuaciones algebraicas (acopladas) para los coeficientes \tilde{A}_n que, en principio, es exacto: uno lo resuelve, utiliza la transformada inversa de Laplace para pasar de \tilde{A}_n a A_n , y obtiene G . Sin embargo, como hay infinitos coeficientes \tilde{A}_n que encontrar (pues n va desde menos infinito hasta más infinito independientemente de la forma particular de $V(t)$), en la práctica el sistema se resuelve considerando un n_{\max} en el que se corta la jerarquía de los \tilde{A}_n (i.e., se asume $\tilde{A}_n = 0$ para $n > n_{\max}$) y se aproxima

$$G(t, t') \simeq \sum_{n=-n_{\max}}^{n_{\max}} A_n(t - t') e^{in\omega_d t}. \quad (2.28)$$

Más adelante vamos a ver que la Ec. (2.27) es especialmente útil pues a tiempos largos, que es el régimen que nos va a interesar, todas las cantidades relevantes del modelo dependen de los coeficientes \tilde{A}_n , en vez de los A_n , y no hace falta utilizar la transformada inversa de Laplace.

Con la Ec. (2.27) ya tenemos el problema resuelto: conocemos $X(t)$ y $q_\alpha(t)$ en función de G , a G en función de A_n , y tenemos la ecuación que define los \tilde{A}_n . Con esta información podemos calcular la evolución temporal de cualquier observable del modelo que dependa de X , P , q_α , y p_α .

2.3 Propiedades de la función de Green G

En esta sección vamos a discutir cuatro propiedades importantes de la función de Green G , tres de ellas en términos de la transformada de Laplace de sus coeficientes, \tilde{A}_n . La primera, segunda y tercera propiedad resultarán útiles para realizar cálculos, como por ejemplo obtener las corrientes de calor de cada \mathcal{E}_α . Por otro lado, la cuarta propiedad está relacionada a la existencia de un régimen estacionario estable para \mathcal{S} .

2.3.1 Conjugación

De su definición en la Ec. (2.16) podemos ver que G tiene que ser una función real. Para asegurar que esto ocurre para todo tiempo, tiene que suceder que $A_n(t) = A_{-n}^*(t)$ (de ahora en más, el asterisco como supraíndice indicará el conjugado complejo). Es inmediato ver que esta condición implica

$$\boxed{\tilde{A}_n(s) = \tilde{A}_{-n}^*(s^*)}, \quad (2.29)$$

con $s \in \mathbb{C}$. En las Ecs. (2.26) y (2.29) consideramos la posibilidad de que el argumento de los \tilde{A}_n sea un número complejo. Más adelante veremos que será necesario evaluarlos en números puramente imaginarios. Es decir, aparecerán integrales del tipo

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t dt' A_n(t') e^{-i\omega t'} = \tilde{A}_n(i\omega). \quad (2.30)$$

Este tipo de expresiones no deben ser tomadas de forma literal ya que podrían ni siquiera estar bien definidas. Más bien, deben ser entendidas como el límite

$$\tilde{A}_n(i\omega) \doteq \lim_{\sigma \rightarrow 0^+} \tilde{A}_n(\sigma + i\omega), \quad (2.31)$$

con σ y ω números reales.

2.3.2 Traslación del argumento

Vamos a probar que si el potencial es tal que $V(t) = V(t_0 - t)$ para algún t_0 (notar que esta es una propiedad distinta a la periodicidad que habíamos supuesto antes), entonces vale

$$\tilde{A}_n(s) = \tilde{A}_{-n}^T(s + in\omega_d) e^{-in\omega_d t_0}, \quad (2.32)$$

donde el supraíndice T indica la matriz traspuesta. En particular, nos va a interesar el caso $T = 0$, en el cual se cumple

$$\boxed{\tilde{A}_n(s) = \tilde{A}_{-n}^T(s + in\omega_d)}. \quad (2.33)$$

Debido a que estamos resolviendo un problema de valores iniciales que comienza en $t = 0$, sin pérdida de generalidad podemos extender $V(t)$ a valores negativos como $V(-t) = V(t)$ y, por lo tanto, vamos a suponer que la propiedad mostrada en la Ec. (2.33) vale siempre.

Para demostrar la Ec. (2.32) vamos a definir dos vectores y una matriz. El primero de ellos es $\tilde{A}(s)$, cuya componente n -ésima coincide con $\tilde{A}_n(s)$:

$$\tilde{A}^T(s) = (\dots, \tilde{A}_{-2}(s), \tilde{A}_{-1}(s), \tilde{A}_0(s), \tilde{A}_1(s), \tilde{A}_2(s), \dots). \quad (2.34)$$

El segundo es \mathcal{I}_n , cuyas componentes son todas iguales a cero, excepto por la n -ésima que es igual a la matriz identidad $\mathbb{1}_{N_S}$. En otras palabras, \mathcal{I}_n es el n -ésimo elemento de la base canónica del espacio en el que vive el vector $\tilde{A}(s)$:

$$\langle \mathcal{I}_n, \tilde{A}(s) \rangle = \tilde{A}_n(s), \quad (2.35)$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota el producto interno correspondiente. Finalmente, la matriz que vamos a utilizar es

$$\mathcal{M}_{m,n}(s) = \tilde{g}^{-1}(s + im\omega_d)\delta_{m,n} + (1 - \delta_{m,n})V_{m-n}. \quad (2.36)$$

Con estos dos vectores y la matriz, la Ec. (2.27) puede ser escrita como $\mathcal{M}(s)\tilde{A}(s) = \mathcal{I}_0$. Asumiendo que \mathcal{M} es invertible (en caso contrario o no habría solución o no sería única), su solución es $\tilde{A}(s) = \mathcal{M}^{-1}(s)\mathcal{I}_0$ o, escrita en componentes,

$$\tilde{A}_n(s) = \mathcal{I}_n^T \mathcal{M}^{-1}(s)\mathcal{I}_0. \quad (2.37)$$

Ahora escribamos la Ec. (2.27) pero con el argumento trasladado en $il\omega_d$, con $l \in \mathbb{Z}$ (es decir, $s \rightarrow s + il\omega_d$):

$$\sum_n \mathcal{M}_{m,n}(s + il\omega_d)\tilde{A}_n(s + il\omega_d) = \mathbb{1}_{N_S}\delta_{m,0}. \quad (2.38)$$

Usando que $\mathcal{M}_{m,n}(s + il\omega_d) = \mathcal{M}_{m+l,n+l}(s)$ y redefiniendo los índices de las sumas como $m+l \rightarrow m$ y $n+l \rightarrow n$, la Ec. (2.38) queda:

$$\sum_n \mathcal{M}_{m,n}(s)\tilde{A}_{n-l}(s + il\omega_d) = \mathbb{1}_{N_S}\delta_{m-l,0}. \quad (2.39)$$

Por otro lado, debido a que $V(t) = V(t_0 - t)$, entonces $V_{-n} = V_n e^{in\omega_d t_0}$. Ésto implica que

$$\mathcal{M}_{m,n}(s) = \mathcal{M}_{n,m}(s) e^{i(n-m)\omega_d t_0} \quad (2.40)$$

Reemplazando el resultado anterior en la Ec. (2.39) llegamos a:

$$\sum_n \mathcal{M}_{n,m}(s)\tilde{A}_{n-l}(s + il\omega_d) e^{i(n-l)\omega_d t_0} = \mathbb{1}_{N_S}\delta_{m,l}, \quad (2.41)$$

donde en la exponencial compleja reemplazamos el índice m por el l debido a la delta de Kronecker del lado derecho de la igualdad. Notamos que el vector cuya n -ésima componente es $\tilde{A}_{n-l}(s) e^{i(n-l)\omega_d t_0}$ es simplemente el vector $\tilde{A}(s)$ pero desplazado l filas y multiplicado por una fase. A este nuevo vector que tiene a $\tilde{A}_{n-l}(s) e^{i(n-l)\omega_d t_0}$ como n -ésimo elemento lo vamos a llamar $\tilde{A}_\dagger(s)$. Entonces, la Ec. (2.41) escrita de forma matricial es

$$\mathcal{M}^T(s)\tilde{A}_\dagger(s) = \mathcal{I}_l, \quad (2.42)$$

y, por lo tanto, su solución es

$$\tilde{A}_{-l}(s + il\omega_d) e^{-il\omega_d t_0} = \mathcal{I}_0^T \mathcal{M}^{T-1}(s)\mathcal{I}_l. \quad (2.43)$$

Cambiando el índice l por el índice n en la Ec. (2.43) y comparándola con la Ec. (2.37), concluimos que

$$\tilde{A}_n(s) = \tilde{A}_{-n}^T(s + in\omega_d) e^{-in\omega_d t_0}, \quad (2.44)$$

que era lo que queríamos demostrar.

2.3.3 Parte imaginaria de la función de Green estática

En esta sección vamos a demostrar que

$$\boxed{\operatorname{Im}[\tilde{g}^{-1}(i\omega)] = \frac{\pi}{2} I(\omega)}, \quad (2.45)$$

donde $I(\omega) = \sum_{\alpha} I_{\alpha}(\omega)$ y extendimos la definición de la densidad espectral a frecuencias negativas como una función impar, de forma tal que $I_{\alpha}(-\omega) \doteq -I_{\alpha}(\omega)$. Recordamos que $\tilde{g}(s) = [M(s^2 + \omega_r^2) + s\tilde{\gamma}(s)]^{-1}$ era la transformada de Laplace de la función de Green $g(t - t')$ del problema estático (es decir, con $V(t) = V_0$). Notamos que en la Ec. (2.45) \tilde{g} está evaluada en un argumento imaginario, por lo que para poder llegar a la igualdad deseada necesitamos estudiar el límite

$$\tilde{\gamma}(i\omega) \doteq \lim_{\sigma \rightarrow 0^+} \tilde{\gamma}(\sigma + i\omega). \quad (2.46)$$

La transformada de Laplace del núcleo de disipación está dada por

$$\tilde{\gamma}(s) = \int_0^{\infty} du \frac{I(u)}{u} \frac{s}{u^2 + s^2}. \quad (2.47)$$

Primero reescribimos la Ec. (2.47) descomponiendo en fracciones simples el integrando:

$$\tilde{\gamma}(s) = \frac{1}{2}i \int_0^{\infty} du \frac{I(u)}{u} \left(\frac{1}{u + is} - \frac{1}{u - is} \right) \quad (2.48)$$

Segundo, extendemos la definición de la densidad espectral a frecuencias negativas como una función impar: $I(-\omega) \doteq -I(\omega)$. Ésto nos permite escribir

$$\tilde{\gamma}(s) = \frac{1}{2}i \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{I(u)}{u} \frac{1}{u + is}. \quad (2.49)$$

Ahora evaluamos en $s = \sigma + i\omega$:

$$\tilde{\gamma}(\sigma + i\omega) = \frac{1}{2}i \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{I(u)}{u} \frac{1}{u - \omega + i\sigma}. \quad (2.50)$$

Finalmente, utilizando el teorema de Sokhotski–Plemelj, tomamos el límite correspondiente

$$\tilde{\gamma}(i\omega) \doteq \lim_{\sigma \rightarrow 0^+} \tilde{\gamma}(\sigma + i\omega) = \frac{\pi}{2} \frac{I(\omega)}{\omega} + \frac{1}{2}i \text{ p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{I(u)}{u} \frac{1}{u - \omega}, \quad (2.51)$$

donde p.v. denota el valor principal de Cauchy de la integral. Entonces, si tomamos el límite en \tilde{g}^{-1} , obtenemos

$$\tilde{g}^{-1}(i\omega) \doteq \lim_{\sigma \rightarrow 0^+} \tilde{g}^{-1}(\sigma + i\omega) = M(\omega_r^2 - \omega^2) - \frac{1}{2} \text{ p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{I(u)}{u} \frac{\omega}{u - \omega} + \frac{\pi}{2} i I(\omega), \quad (2.52)$$

por lo que

$$\operatorname{Im}[\tilde{g}^{-1}(i\omega)] = \frac{\pi}{2} I(\omega), \quad (2.53)$$

que es la igualdad que queríamos demostrar.

2.3.4 Comportamiento a tiempos largos

Con el objetivo de entender el comportamiento de S a tiempos largos vamos a estudiar el límite

$$A_n(\infty) \doteq \lim_{t \rightarrow \infty} A_n(t). \quad (2.54)$$

La existencia de $A_n(\infty)$ no siempre está garantizada. Por ejemplo, si el entorno está formado por una cantidad numerable de osciladores (no necesariamente finita), ese límite no existe. Una condición necesaria, pero no suficiente, es que éste esté formado por un continuo de osciladores. Es decir, que la densidad espectral de \mathcal{E}_α , que antes definimos como

$$I_\alpha(\omega) = \frac{1}{m\omega} C_\alpha \delta(\omega - \omega_a) C_\alpha^T \quad (2.55)$$

y era una suma de N_α términos (uno por cada oscilador en \mathcal{E}_α), sea reemplazada por una función analítica de la variable ω . De ahora en más vamos a suponer que éste es el caso y sólo consideraremos entornos continuos. En la **Sección 2.4** discutiremos sobre la diferencia entre entornos continuos y discretos, y sobre los límites del modelo que estamos utilizando.

Bajo ciertas condiciones sobre la función \tilde{A}_n , como por ejemplo que todos sus polos estén contenidos en el semiplano $\text{Re}(s) < 0$ y que tenga como máximo un polo en el origen, el teorema del valor final de la transformada de Laplace nos dice que el límite (2.54) existe y además

$$A_n(\infty) = \lim_{s \rightarrow 0^+} s \tilde{A}_n(s). \quad (2.56)$$

Si multiplicamos por s a la Ec. (2.27), tomamos el límite cuando s tiende a cero, y utilizamos la Ec. (2.56), llegamos al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\sum_n \mathcal{M}_{m,n}(0) A_n(\infty) = 0, \quad (2.57)$$

donde \mathcal{M} es la matriz definida anteriormente. Luego, como $\mathcal{M}(0)$ es invertible (arriba suposimos que lo era para cualquier valor de s), entonces la única solución es $A_n(\infty) = 0$. Es decir, si $A_n(\infty)$ existe, entonces necesariamente tiene que ser $A_n(\infty) = 0$ y la función de Green G decae a tiempos largos. Un criterio posible para decidir sobre la invertibilidad de $\mathcal{M}(0)$ es comprobar si es una matriz diagonal dominante en bloques (generalización del teorema de Levy-Desplanques). Es decir, si se cumple que

$$\min_n \{ \|\tilde{g}(in\omega_d)\|^{-1} \} > \sum_{m \neq 0} \|V_m\|, \quad (2.58)$$

donde $\|\cdot\|$ es la norma usual de operadores. La Ec. (2.58) compara el efecto de la disipación inducida por el entorno (la transformada de Laplace del núcleo de disipación, $\tilde{\gamma}$, domina el lado izquierdo de la desigualdad) y el efecto del driving (que domina el lado derecho). Por lo tanto, existe un régimen estacionario estable para S si la disipación es lo suficientemente fuerte como para hacer valer la desigualdad mostrada en la Ec. (2.58).

2.4 Entornos continuos y los límites del modelo

En esta sección vamos a ilustrar la diferencia entre un entorno discreto y uno continuo, y discutir sobre los límites del modelo que estamos utilizando. Con este fin, consideremos

el escenario más sencillo posible, en el que \mathcal{S} está formado por un único oscilador de masa M acoplado a un solo entorno \mathcal{E} . Además, supongamos que nos encontramos en el caso estático en el que $V(t) = V_0$.

Analicemos primero qué sucede si \mathcal{E} está formado por N osciladores discretos. En tal caso, la densidad espectral es

$$I(\omega) = \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i). \quad (2.59)$$

Esta densidad espectral conduce a un núcleo de disipación γ cuya transformada de Laplace es

$$\tilde{\gamma}(s) = \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i \omega_i^2} \frac{s}{s^2 + \omega_i^2}, \quad (2.60)$$

y, entonces, la transformada de Laplace de la función de Green estática g nos queda

$$\begin{aligned} \tilde{g}^{-1}(s) &= M(s^2 + \omega_r^2) + \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i \omega_i^2} \frac{s^2}{s^2 + \omega_i^2} \\ &= \frac{1}{\prod_{i=1}^N (s^2 + \omega_i^2)} \left[M(s^2 + \omega_r^2) \prod_{i=1}^N (s^2 + \omega_i^2) + \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i \omega_i^2} \prod_{j \neq i}^N s^2 (s^2 + \omega_j^2) \right]. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Debido a que g es una función racional, su transformada inversa de Laplace se puede escribir de forma sencilla como

$$g(t) = \sum_{n=1}^{2(N+1)} R_n e^{p_n t}, \quad (2.62)$$

donde p_n son los polos de g , que coinciden con las raíces del polinomio

$$P(s) = M(s^2 + \omega_r^2) \prod_{i=1}^N (s^2 + \omega_i^2) + \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i \omega_i^2} \prod_{j \neq i}^N s^2 (s^2 + \omega_j^2), \quad (2.63)$$

y R_n los residuos en los respectivos polos. Notamos que P es un polinomio con solo potencias pares y, por lo tanto, si p_n es una raíz, $-p_n$ también lo es. Luego, las raíces de P tienen que ser puramente imaginarias o, en caso contrario, g divergiría exponencialmente rápido (ver la Ec. (2.62) con $\text{Re}(p_n) > 0$ para algún n). Entonces, si llamamos $p_n = i\omega_n$, podemos escribir

$$g(t) = 2 \sum_{n=1}^{N+1} \text{Re}(R_n e^{i\omega_n t}). \quad (2.64)$$

Suponiendo que todas las frecuencias ω_n son conmensurables entre ellas (es decir, la razón ω_n/ω_m es un número racional para todo n y m), g es periódica con período al menos $\tau = \text{mcm}\{2\pi/\omega_n\}$, donde mcm denota al múltiplo común menor. Por lo tanto, a tiempos al menos $t = \tau$, \mathcal{S} retorna a su estado inicial. Si las frecuencias no son conmensurables, como cualquier número irracional se puede aproximar con precisión arbitrariamente alta por un número racional, entonces g es casi periódica y \mathcal{S} no retorna exactamente a su estado inicial pero sí arbitrariamente cerca de él. En cualquier caso, no existe un régimen estacionario estable para \mathcal{S} en el que g decaiga a cero a tiempos largos. Este ejemplo fue un caso particular del teorema de recurrencia de Poincaré, que vale bajo hipótesis mucho más relajadas que las supuestas arriba.

Ahora pasemos al caso de un entorno continuo. Para ello, reemplazamos la densidad espectral de la Ec. (2.59) por una función analítica de ω . En modelos fenomenológicos se suele utilizar una función que sea lineal en ω para frecuencias chicas junto con una constante de amortiguamiento $\gamma_0 > 0$ independiente de la frecuencia, de modo tal que $I(\omega) \propto \gamma_0 \omega$ cuando $\omega \rightarrow 0$. A esta forma de densidad espectral se la denomina Ohmica y da lugar a un amortiguamiento de \mathcal{S} con una tasa igual a γ_0 . Además, para evitar expresiones divergentes, se la multiplica por una función $f_\Lambda(\omega)$, que depende de una frecuencia de corte $\Lambda > 0$ cuyo valor particular es insignificante excepto por el hecho de que debe ser mayor que cualquier frecuencia físicamente relevante del modelo, y debe cumplir las condiciones

$$\begin{aligned}\lim_{\omega \rightarrow 0} f_\Lambda(\omega) &= 1 \\ \lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega f_\Lambda(\omega) &= 0.\end{aligned}\tag{2.65}$$

Por ejemplo, dos funciones utilizadas comúnmente son $f_\Lambda(\omega) = e^{-\omega/\Lambda}$ (corte exponencial) y $f_\Lambda(\omega) = \Lambda^2/(\omega^2 + \Lambda^2)$ (corte de Lorentz-Drude). Entonces, la forma funcional de la densidad espectral a utilizar es

$$I(\omega) = \gamma_0 \omega M f_\Lambda(\omega).\tag{2.66}$$

Para ilustrar este caso consideremos el corte de tipo Lorentz-Drude

$$I(\omega) = \gamma_0 \omega M \frac{\Lambda^2}{\omega^2 + \Lambda^2},\tag{2.67}$$

de modo que la transformada de Laplace del núcleo de disipación sea

$$\tilde{\gamma}(s) = \frac{\pi}{2} \gamma_0 M \frac{1}{s + \Lambda}.\tag{2.68}$$

Ésto nos conduce a la transformada de Laplace de la función de Green estática g :

$$\begin{aligned}\tilde{g}^{-1}(s) &= M \left(s^2 + \omega_r^2 + \frac{\pi}{2} \gamma_0 \frac{s}{s + \Lambda} \right) \\ &= \frac{M}{s + \Lambda} \left[s^3 + \Lambda s^2 + \left(\frac{\pi}{2} \gamma_0 + \omega_r^2 \right) s + \Lambda \omega_r^2 \right].\end{aligned}\tag{2.69}$$

Nuevamente, como \tilde{g} es una función racional, podemos escribir la transformada inversa de Laplace como

$$g(t) = \sum_{n=1}^3 R_n e^{p_n t},\tag{2.70}$$

donde ahora los p_n coinciden con las raíces del polinomio

$$Q(s) = s^3 + \Lambda s^2 + \left(\frac{\pi}{2} \gamma_0 + \omega_r^2 \right) s + \Lambda \omega_r^2.\tag{2.71}$$

Debido a que Q es un polinomio con coeficientes reales y grado 3, tiene que tener al menos una raíz real y las otras dos deben ser complejas conjugadas. Podemos saber el signo de la parte real de sus raíces utilizando el criterio de estabilidad de Routh–Hurwitz. Para un polinomio de grado 3 de la forma $s^3 + a_2 s^2 + a_1 s + a_0$, afirma que sus raíces se encuentran en el semiplano complejo izquierdo abierto (es decir, tienen parte real negativa) si y sólo si los

coeficientes a_0 , a_1 y a_2 son positivos y, además, $a_2 a_1 > a_0$. Los coeficientes de Q son todos positivos y se cumple que

$$\frac{\pi}{2} \gamma_0 + \omega_r^2 > \omega_r^2, \quad (2.72)$$

por lo tanto todos los p_n tienen parte real negativa y la función de Green g decae exponencialmente rápido en el tiempo. Notar que la desigualdad en la Ec. (2.72) se satisface sólo por la presencia de γ_0 . Es decir, \mathcal{S} se vuelve estable por la disipación inducida por el entorno. Si no hubiese entorno, el polinomio sería $Q(s) = M(s^2 + \omega_r^2)$, que tiene dos raíces imaginarias y g oscilaría con frecuencia ω_r .

A pesar de que mostramos que los entornos continuos inducen disipación en \mathcal{S} y son necesarios para que éste presente un régimen estacionario estable en el que g decae en el tiempo, a la hora de hacer cuentas numéricas el entorno necesariamente se tiene que discretizar (por ejemplo, al resolver integrales se elige el ancho de cada elemento de la partición del intervalo de integración). Por lo tanto, si consideramos un entorno uniformemente equiespaciado en frecuencias, separadas por un intervalo $\delta\omega$, aunque incluyamos disipación en forma de una densidad espectral como la de la Ec. (2.66), el modelo va a ser realista como máximo hasta el tiempo de la primera recurrencia $t_{\max} \simeq 1/\delta\omega$. Para tiempos mayores a ese no podemos concluir nada numéricamente (aunque analíticamente no haya ningún problema con las expresiones obtenidas).

2.5 Estado asintótico del sistema

Como lo venimos anticipando en secciones anteriores, \mathcal{S} alcanza un régimen estacionario estable a tiempos largos (también llamado *ciclo límite*). Éste es un resultado conocido que se puede obtener en modelos mucho más generales que el que estamos utilizando bajo ciertas hipótesis ergódicas razonables sobre el entorno [51, 52]. En esta sección vamos a calcular explícitamente el estado al que llega \mathcal{S} . Para simplificar los cálculos vamos a describir la evolución temporal de \mathcal{S} en el espacio de fases y además suponer dos cosas:

- El estado global inicial $\rho(t=0)$ es Gaussiano. Es decir, la densidad de cuasiprobabilidad de Wigner correspondiente a $\rho(0)$ es una función Gaussiana multivariada de sus variables:

$$W_{\rho(0)}(\mathbf{X}) = \frac{1}{(2\pi)^N \sqrt{\det(\boldsymbol{\sigma})}} e^{-(\mathbf{X}-\mathbf{d})^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} (\mathbf{X}-\mathbf{d})}, \quad (2.73)$$

donde N es la dimensión del espacio de fases global, \mathbf{d} es el vector de los primeros momentos de las coordenadas adimensionalizadas de \mathcal{S} y \mathcal{E} , y $\boldsymbol{\sigma}$ es la matriz de segundos momentos, también conocida como matriz de covarianza.

- El estado inicial es un estado producto, y los valores medios iniciales de las coordenadas de \mathcal{S} y \mathcal{E} son iguales a cero:

$$\text{tr}[\rho(0)X] = \text{tr}[\rho(0)P] = \text{tr}[\rho(0)q_\alpha] = \text{tr}[\rho(0)p_\alpha] = 0. \quad (2.74)$$

Ésto implica que $\mathbf{d} = 0$, y entonces la Ec. (2.73) se reduce a

$$W_{\rho(0)}(\mathbf{X}) = \frac{1}{(2\pi)^N \sqrt{\det(\boldsymbol{\sigma})}} e^{-\mathbf{X}^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} \mathbf{X}}, \quad (2.75)$$

con $\boldsymbol{\sigma}$ la suma directa entre $\boldsymbol{\sigma}_S$ y $\boldsymbol{\sigma}_E = \bigoplus_\alpha \boldsymbol{\sigma}_{E_\alpha}$.

Debido a que la evolución temporal generada por Hamiltonianos cuadráticos preserva estados Gaussianos, la función de Wigner a un tiempo arbitrario t está dada por

$$W_\rho(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{(2\pi)^N \sqrt{\det[\boldsymbol{\sigma}(t)]}} e^{-\mathbf{x}^T \boldsymbol{\sigma}^{-1}(t) \mathbf{x}}, \quad (2.76)$$

con $W_\rho(\mathbf{X}, 0) = W_{\rho(0)}(\mathbf{X})$. Por lo tanto, solo necesitamos conocer la evolución de la matriz de covariancia $\boldsymbol{\sigma}$. De hecho, solo nos interesa el estado de \mathcal{S} y no el estado global. Entonces, podemos marginalizar sobre las coordenadas de \mathcal{E} para obtener la función de Wigner correspondiente a \mathcal{S} :

$$W_{\rho_S}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{2N_S} \sqrt{\det[\boldsymbol{\sigma}_S(t)]}} e^{-\mathbf{x}^T \boldsymbol{\sigma}_S^{-1}(t) \mathbf{x}}, \quad (2.77)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}_S$ es una matriz real de dimensión $2N_S \times 2N_S$ dada por

$$\boldsymbol{\sigma}_S(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \text{tr}[\rho(0)\{X(t), X(t)\}] & \text{tr}[\rho(0)\{X(t), P(t)\}] \\ \text{tr}[\rho(0)\{X(t), P(t)\}] & \text{tr}[\rho(0)\{P(t), P(t)\}] \end{pmatrix} \quad (2.78)$$

(con X y P correctamente adimensionalizados). En lo que sigue vamos a calcular explícitamente $\boldsymbol{\sigma}_S$ y ver que a tiempos largos es periódica con período τ_d , lo que implica que $W_{\rho_S}(\mathbf{x}, t)$ y ρ_S también lo son. De ahora en más, en vez de escribir explícitamente la función traza, notaremos los valores medios respecto al estado inicial $\rho(0)$ con corchetes angulares: $\langle A(t) \rangle = \text{tr}[\rho(0)A(t)]$ para cualquier operador A .

Vamos a comenzar calculando el primer bloque de $\boldsymbol{\sigma}_S$: $\langle \{X(t), X(t)\} \rangle$. Para ello utilizamos la solución que hallamos en la **Sección 2.2** dada por la Ec. (2.19). Un cálculo directo nos lleva a

$$\begin{aligned} \langle \{X(t), X(t)\} \rangle &= \langle \{X^h(t), X^h(t)\} \rangle \\ &+ \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 G(t, t_1) C_\alpha \langle \{q_\alpha^h(t_1), q_\beta^h(t_2)\} \rangle C_\beta^T G^T(t, t_2). \end{aligned} \quad (2.79)$$

Para continuar necesitamos $\langle \{q_\alpha^h(t_1), q_\beta^h(t_2)\} \rangle$. Vamos a llamar

$$\begin{aligned} \langle \{q_\alpha^0, q_\beta^0\} \rangle &= \hbar (m_\alpha \omega_\alpha)^{-1} A_\alpha(\omega_\alpha) \delta_{\alpha, \beta} \\ \langle \{p_\alpha^0, p_\beta^0\} \rangle &= \hbar m_\alpha \omega_\alpha B_\alpha(\omega_\alpha) \delta_{\alpha, \beta} \\ \langle \{q_\alpha^0, p_\beta^0\} \rangle &= \hbar D_\alpha(\omega_\alpha) \delta_{\alpha, \beta} \end{aligned} \quad (2.80)$$

donde A_α y B_α son funciones positivas, y D_α es arbitraria. A_α , B_α y D_α no solo dependen explícitamente de las frecuencias ω_α , sino que también dependen implícitamente de varios parámetros de \mathcal{E}_α , como podrían ser la temperatura o el grado de *squeezing*, por ejemplo. Además, para simplificar las expresiones, definimos dos funciones de la forma

$$\begin{aligned} f_\alpha(\omega) &= [A_\alpha(\omega) + B_\alpha(\omega)]/2 \\ g_\alpha(\omega) &= [A_\alpha(\omega) - B_\alpha(\omega)]/2. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Luego, el resultado es

$$\begin{aligned} \langle \{q_\alpha^h(t_1), q_\beta^h(t_2)\} \rangle &= \hbar (m_\alpha \omega_\alpha)^{-1} \delta_{\alpha, \beta} \{ f_\alpha(\omega_\alpha) \text{Re}[e^{i\omega_\alpha(t_1-t_2)}] + g_\alpha(\omega_\alpha) \text{Re}[e^{i\omega_\alpha(t_1+t_2)}] \\ &+ D_\alpha(\omega_\alpha) \text{Im}[e^{i\omega_\alpha(t_1+t_2)}] \}. \end{aligned} \quad (2.82)$$

Reemplazando ésto en la Ec. (2.79) llegamos a

$$\begin{aligned}
& \langle \{X(t), X(t)\} \rangle \\
&= \langle \{X^h(t), X^h(t)\} \rangle \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \operatorname{Re} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 G(t, t_1) C_{\alpha} (m_{\alpha} \omega_{\alpha})^{-1} f_{\alpha}(\omega_{\alpha}) e^{i\omega_{\alpha}(t_1-t_2)} \rangle C_{\alpha}^T G^T(t, t_2) \right] \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \operatorname{Re} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 G(t, t_1) C_{\alpha} (m_{\alpha} \omega_{\alpha})^{-1} g_{\alpha}(\omega_{\alpha}) e^{i\omega_{\alpha}(t_1+t_2)} \rangle C_{\alpha}^T G^T(t, t_2) \right] \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \operatorname{Im} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 G(t, t_1) C_{\alpha} (m_{\alpha} \omega_{\alpha})^{-1} D_{\alpha}(\omega_{\alpha}) e^{i\omega_{\alpha}(t_1+t_2)} \rangle C_{\alpha}^T G^T(t, t_2) \right].
\end{aligned} \tag{2.83}$$

Utilizando la densidad espectral ($I_{\alpha} = C_{\alpha} \delta(\omega - \omega_{\alpha}) C_{\alpha}^T / m\omega$) podemos reescribir la ecuación anterior como:

$$\begin{aligned}
& \langle \{X(t), X(t)\} \rangle \\
&= \langle \{X^h(t), X^h(t)\} \rangle \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} d\omega \left[\int_0^t dt_1 G(t, t_1) e^{i\omega t_1} \right] I_{\alpha}(\omega) \left[\int_0^t dt_2 G^T(t, t_2) e^{-i\omega t_2} \right] f_{\alpha}(\omega) \right\} \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} d\omega \left[\int_0^t dt_1 G(t, t_1) e^{i\omega t_1} \right] I_{\alpha}(\omega) \left[\int_0^t dt_2 G^T(t, t_2) e^{i\omega t_2} \right] g_{\alpha}(\omega) \right\} \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \operatorname{Im} \left\{ \int_0^{\infty} d\omega \left[\int_0^t dt_1 G(t, t_1) e^{i\omega t_1} \right] I_{\alpha}(\omega) \left[\int_0^t dt_2 G^T(t, t_2) e^{i\omega t_2} \right] D_{\alpha}(\omega) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.84}$$

El paso siguiente es substituir G en las integrales temporales por su expansión en coeficientes A_n dada por la Ec. (2.24). Es decir, escribimos

$$\int_0^t dt_1 G(t, t_1) e^{i\omega t_1} = \sum_n e^{i(\omega+n\omega_d)t} \int_0^t dt_1 A_n(t_1) e^{-i\omega t_1}. \tag{2.85}$$

Entonces, tenemos

$$\begin{aligned}
& \langle \{X(t), X(t)\} \rangle = \langle \{X^h(t), X^h(t)\} \rangle \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \sum_{n,m} \operatorname{Re} \left\{ e^{i(n-m)\omega_d t} \int_0^{\infty} d\omega \left[\int_0^t dt_1 A_n(t_1) e^{-i\omega t_1} \right] I_{\alpha}(\omega) \right. \\
&\quad \times \left. \left[\int_0^t dt_2 A_m^T(t_2) e^{i\omega t_2} \right] f_{\alpha}(\omega) \right\} \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \sum_{n,m} \operatorname{Re} \left\{ e^{i(n+m)\omega_d t} \int_0^{\infty} d\omega \left[\int_0^t dt_1 A_n(t_1) e^{-i\omega t_1} \right] I_{\alpha}(\omega) \right. \\
&\quad \times \left. \left[\int_0^t dt_2 A_m^T(t_2) e^{-i\omega t_2} \right] g_{\alpha}(\omega) e^{2i\omega t} \right\} \\
&+ \hbar \sum_{\alpha} \sum_{n,m} \operatorname{Im} \left\{ e^{i(n+m)\omega_d t} \int_0^{\infty} d\omega \left[\int_0^t dt_1 A_n(t_1) e^{-i\omega t_1} \right] I_{\alpha}(\omega) \right. \\
&\quad \times \left. \left[\int_0^t dt_2 A_m^T(t_2) e^{-i\omega t_2} \right] D_{\alpha}(\omega) e^{2i\omega t} \right\}.
\end{aligned} \tag{2.86}$$

Finalmente, consideramos el límite a tiempos largos. Debido a que estamos usando entornos continuos que inducen disipación en \mathcal{S} , por un lado,

$$\langle \{X^h(t), X^h(t)\} \rangle \longrightarrow 0 \quad (2.87)$$

y, por el otro,

$$\int_0^t dt_1 A_n(t_1) e^{-i\omega t_1} \longrightarrow \tilde{A}_n(i\omega). \quad (2.88)$$

Además, los dos últimos sumandos de la Ec. (2.86) son del estilo

$$\int_0^\infty d\omega F(\omega) e^{2i\omega t} \quad (2.89)$$

que, por el lema de Riemann–Lebesgue, tienden a cero cuando t tiende a infinito. Por lo tanto,

$$\langle \{X(t), X(t)\} \rangle \longrightarrow \hbar \sum_\alpha \sum_{n,m} \operatorname{Re} \left\{ e^{i(n-m)\omega_d t} \int_0^\infty d\omega \tilde{A}_n(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_m^\dagger(i\omega) f_\alpha(\omega) \right\}. \quad (2.90)$$

Podemos dar un paso más en la Ec. (2.90) que va a ser ilustrativo para los capítulos siguientes. Para ello, notamos que el valor de expectación inicial de $H_{\mathcal{E}_\alpha}$ se puede escribir de la forma

$$\begin{aligned} \langle H_{\mathcal{E}_\alpha} \rangle &= \operatorname{tr}[m_\alpha^{-1} \langle \{p_\alpha^0, p_\alpha^0\} \rangle] / 4 + \operatorname{tr}[m_\alpha \omega_\alpha^2 \langle \{q_\alpha^0, q_\alpha^0\} \rangle] / 4 \\ &= \hbar \operatorname{tr}[\omega_\alpha f_\alpha(\omega_\alpha)] / 2. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Entonces, podemos escribir $f_\alpha(\omega) = 2n_\alpha^0(\omega) + 1$, donde $n_\alpha^0(\omega)$ es el valor de expectación del operador número correspondiente al modo de frecuencia ω en \mathcal{E}_α a $t = 0$. Luego, el resultado final es

$$\langle \{X(t), X(t)\} \rangle \longrightarrow \hbar \sum_\alpha \sum_{n,m} \operatorname{Re} \left\{ e^{i(n-m)\omega_d t} \int_0^\infty d\omega \tilde{A}_n(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_m^\dagger(i\omega) [2n_\alpha^0(\omega) + 1] \right\}. \quad (2.92)$$

Notamos dos cosas. Primero, que $\langle \{X(t), X(t)\} \rangle$ es τ_d periódica a tiempos largos como veníamos anticipando. Segundo, que solo depende del valor medio inicial del operador número de \mathcal{E}_α . Esta interesante propiedad no es única de $\langle \{X(t), X(t)\} \rangle$ y vamos a ver que se va a repetir en todos los observables de interés que calculemos (es decir, que solo van a depender de n_α^0).

Los cálculos para $\langle \{P(t), P(t)\} \rangle$ y $\langle \{X(t), P(t)\} \rangle$ son absolutamente análogos, por lo que no los vamos a repetir. Las expresiones finales correspondientes son:

$$\langle \{P(t), P(t)\} \rangle \longrightarrow \hbar \sum_\alpha \sum_{n,m} \operatorname{Re} \left\{ e^{i(n-m)\omega_d t} \times M \int_0^\infty d\omega (\omega + n\omega_d)(\omega + m\omega_d) \tilde{A}_n(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_m^\dagger(i\omega) [2n_\alpha^0(\omega) + 1] M \right\}. \quad (2.93)$$

y

$$\begin{aligned} \langle \{X(t), P(t)\} \rangle \longrightarrow & \frac{1}{2} \hbar \sum_\alpha \sum_{n,m} \operatorname{Im} \left\{ e^{i(n-m)\omega_d t} \int_0^\infty d\omega (\omega + m\omega_d) \tilde{A}_n(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_m^\dagger(i\omega) [2n_\alpha^0(\omega) + 1] M \right\} \\ & + \frac{1}{2} \hbar \sum_\alpha \sum_{n,m} \operatorname{Im} \left\{ e^{i(m-n)\omega_d t} M \int_0^\infty d\omega (\omega + n\omega_d) \tilde{A}_n(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_m^\dagger(i\omega) [2n_\alpha^0(\omega) + 1] \right\} \end{aligned} \quad (2.94)$$

En conclusión, \mathcal{S} alcanza un régimen estacionario estable a tiempos largos que es periódico con la misma periodicidad que $V(t)$, y además solo depende del estado inicial de los \mathcal{E}_α mediante n_α^0 .

2.6 Resumen

En esta sección haremos un resumen de los puntos fundamentales y necesarios para entender el resto de este trabajo, dejando de lado los detalles y las demostraciones que incluimos en las secciones anteriores de este capítulo.

El modelo que consideramos y que, en el siguiente capítulo, utilizaremos para describir un motor cuántico consta de un sistema \mathcal{S} formado por una red de N_S osciladores sometidos a un potencial externo periódico $V(t)$ y acoplado a un entorno \mathcal{E} , dividido en distintas partes \mathcal{E}_α . Cada \mathcal{E}_α está formado por N_α osciladores armónicos desacoplados y comienza en un estado completamente arbitrario. La dinámica global está regida por el Hamiltoniano

$$H(t) = H_S(t) + H_{\mathcal{E}} + H_{S\mathcal{E}}, \quad (2.95)$$

donde H_S es el Hamiltoniano correspondiente a \mathcal{S} ,

$$H_S(t) = P^T M^{-1} P / 2 + X^T V(t) X / 2, \quad (2.96)$$

$H_{\mathcal{E}}$ el Hamiltoniano del entorno,

$$H_{\mathcal{E}} = \sum_{\alpha} H_{\mathcal{E}_\alpha} = \sum_{\alpha} p_{\alpha}^T m_{\alpha}^{-1} p_{\alpha} / 2 + q_{\alpha}^T m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha} / 2, \quad (2.97)$$

con H_{α} el Hamiltoniano correspondiente a cada \mathcal{E}_α , y $H_{S\mathcal{E}}$ es el Hamiltoniano de interacción,

$$H_{S\mathcal{E}} = \sum_{\alpha} H_{S\mathcal{E}_\alpha} = \sum_{\alpha} X^T C_{\alpha} q_{\alpha}. \quad (2.98)$$

Arriba utilizamos notación vectorial para el conjunto de posiciones y momentos de \mathcal{S} (X y P) y de cada \mathcal{E}_α (q_{α} y p_{α}). Además, M y $V(t)$ son matrices reales y simétricas, y m_{α} y ω_{α} son matrices reales y diagonales.

Utilizando la ecuación de Heisenberg podemos encontrar explícitamente la evolución de la colección de operadores posición de \mathcal{S} , X , y la de los de \mathcal{E}_α , q_{α} :

$$\boxed{X(t) = X^h(t) - \int_0^t dt' G(t, t') \left[\sum_{\alpha} C_{\alpha} q_{\alpha}^h(t') \right]} \quad (2.99)$$

y

$$\boxed{q_{\alpha}(t) = q_{\alpha}^h(t) - (m_{\alpha} \omega_{\alpha})^{-1} \int_0^t dt' \sin[\omega_{\alpha}(t - t')] C_{\alpha}^T X(t')}, \quad (2.100)$$

donde q_{α}^h es la solución homogénea de la ecuación diferencial correspondiente a q_{α} (ver la Ec. (2.9)),

$$q_{\alpha}^h(t) = \cos(\omega_{\alpha} t) q_{\alpha}^0 + (m_{\alpha} \omega_{\alpha})^{-1} \sin(\omega_{\alpha} t) p_{\alpha}^0, \quad (2.101)$$

X^h la solución homogénea de la ecuación diferencial correspondiente a X (ver la Ec. (2.14)) y cuya forma no es importante pues, en el límite de entornos continuos (ver la **Sección 2.4**),

el estado asintótico de \mathcal{S} es independiente de X^h (ver la **Sección 2.5**), y G es la función de Green retardada de la Ec. (2.14), que se puede escribir como

$$G(t, t') = \sum_n A_n(t - t') e^{in\omega_d t}, \quad (2.102)$$

con ω_d la frecuencia de $V(t)$. Para encontrar los coeficientes A_n de la expansión de G basta con resolver el sistema de ecuaciones lineales acopladas para sus correspondientes transformadas de Laplace \tilde{A}_n , dado por

$$\tilde{g}^{-1}(s + ik\omega_d) \tilde{A}_k(s) + \sum_{n \neq 0} V_n \tilde{A}_{k-n}(s) = \mathbb{1}_{N_S} \delta_{k,0}, \quad (2.103)$$

con $\tilde{g}(s) = [M(s^2 + \omega_r^2) + s\tilde{\gamma}(s)]^{-1}$, donde $\tilde{\gamma}$ es la transformada de Laplace del núcleo de disipación (definido en la Ec. (2.17)), y V_n los coeficientes de la expansión de Fourier de $V(t)$, y finalmente utilizar la transformada inversa de Laplace. De hecho, como vamos a mostrar en el capítulo siguiente, en el límite de entornos continuos y a tiempos largos, todas las cantidades de interés dependen de \tilde{A}_n y no de A_n , por lo que basta con resolver la Ec. (2.103). Con las soluciones mostradas en las Ecs. (2.99) y (2.100) podemos calcular todos los observables necesarios para los capítulos siguientes.

Finalmente destacamos dos puntos importantes sobre el tratamiento de este modelo:

- Inicialmente comenzamos con entornos formados por una cantidad discreta de osciladores pero luego pasamos al límite continuo, donde hay una cantidad infinita no numerable de osciladores que posteriormente llamaremos *modos*. Ésto se logra reemplazando la densidad espectral de cada entorno, originalmente definida como $I_\alpha = C_\alpha \delta(\omega - \omega_\alpha) C_\alpha^T / m\omega$, por una función analítica de la frecuencia de los modos del entorno: $I_\alpha(\omega) = \gamma_{\alpha,0} \omega M f_{\alpha,\Lambda}(\omega)$, donde $\gamma_{\alpha,0} > 0$ es una constante de amortiguamiento, $\Lambda > 0$ es una frecuencia de corte y $f_{\alpha,\Lambda}$ debe cumplir las condiciones mostradas en la Ec. (2.65). La diferencia entre entornos discretos y continuos está discutida en la **Sección 2.4**, pero lo importante es que los entornos continuos inducen disipación en \mathcal{S} , mientras que los discretos no.
- La disipación nombrada en el punto anterior, junto con el potencial externo, inducen en \mathcal{S} un estado asintótico periódico con la misma periodicidad que la de $V(t)$. Es decir, el estado reducido de \mathcal{S} a tiempos largos verifica $\rho_S(t) = \rho_S(t + \tau_d)$. Ésto está demostrado en la **Sección 2.5**. Como veremos en el **Capítulo 3**, el hecho de que \mathcal{S} alcance un estado periódico a tiempos largos permite identificar a \mathcal{S} como la sustancia motora de un motor cíclico y trabajar en un régimen análogo al de los motores que nos son familiares de termodinámica clásica.

Capítulo 3

Termodinámica de los motores cuánticos lineales

En este capítulo vamos a presentar una teoría termodinámica general para la clase de motores cuánticos lineales, que son máquinas cuya sustancia motora es una red arbitraria de osciladores sometidos a un potencial externo periódico y acoplada a un conjunto de reservorios bosónicos que pueden o no ser térmicos. Para ello vamos a considerar la dinámica completa no Markoviana tanto de la sustancia motora como de los reservorios. Queremos enfatizar que todos los resultados presentados en este capítulo son exactos y generales. No será realizada ninguna aproximación.

Primero vamos a mostrar que el modelo que explicamos y resolvimos en el **Capítulo 2** puede ser utilizado para describir un motor de estas características, y que este motor es capaz de realizar cualquier ciclo termodinámico que se desee, sea en equilibrio termodinámico o no. Luego vamos a proceder a enunciar la primera ley de la termodinámica para estas máquinas, que relaciona el trabajo producido con el calor intercambiado por los reservorios, y vamos a estudiar los procesos responsables de dicho intercambio. Vamos a seguir con la segunda ley de la termodinámica en la forma de Kelvin-Planck y vamos a demostrar que la producción irreversible de entropía conduce a una desigualdad generalizada de Clausius. Esta desigualdad, a su vez, nos va a permitir acotar la eficiencia de estos motores con una cota generalizada que coincide con la de Carnot en el caso de reservorios térmicos y puede ser mayor que ésta cuando los reservorios son no térmicos; y vamos a estudiar el costo energético de crear este tipo de reservorios que nos permite obtener eficiencias más altas que las clásicas. Finalmente, vamos a discutir los aspectos clásicos y cuánticos de este motor.

Este capítulo está basado en el trabajo *General theory for thermal and nonthermal quantum linear engines* [41].

3.1 El modelo como motor cuántico

Todos los motores, ya sean clásicos o cuánticos, están constituidos por dos partes fundamentales: una sustancia motora que es la encargada de transformar energía desordenada en forma de calor en trabajo mecánico útil, y un conjunto de reservorios que actúan como fuentes o sumideros para ese calor. La sustancia motora de un motor cuántico lineal es una

red \mathcal{S} de osciladores cuánticos con frecuencias y acoplamientos variables. Acoplado a \mathcal{S} se encuentra un entorno \mathcal{E} , dividido en diferentes piezas \mathcal{E}_α que cumplen el rol de reservorios. Cada \mathcal{E}_α está formado por una colección de osciladores armónicos no interactuantes, inicialmente preparados en estados arbitrarios pero descorrelacionados entre sí. El motor comienza a operar con su sustancia de trabajo descorrelacionada de los reservorios, pero ésto rápidamente cambia debido a la presencia de una interacción que es bilineal en las posiciones de los osciladores de \mathcal{S} y \mathcal{E} . Es decir, el Hamiltoniano que describe al motor y a su evolución temporal es

$$H(t) = H_{\mathcal{S}}(t) + H_{\mathcal{E}} + H_{\mathcal{S}\mathcal{E}}, \quad (3.1)$$

donde $H_{\mathcal{S}}$, $H_{\mathcal{E}}$ y $H_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ son los definidos en la **Sección 2.1**,

$$H_{\mathcal{S}}(t) = P^T M^{-1} P / 2 + X^T V(t) X / 2 \quad (3.2)$$

$$H_{\mathcal{E}} = \sum_{\alpha} H_{\mathcal{E}_\alpha} = \sum_{\alpha} p_{\alpha}^T m_{\alpha}^{-1} p_{\alpha} / 2 + q_{\alpha}^T m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha} / 2 \quad (3.3)$$

$$H_{\mathcal{S}\mathcal{E}} = \sum_{\alpha} H_{\mathcal{S}\mathcal{E}_\alpha} = \sum_{\alpha} X^T C_{\alpha} q_{\alpha}, \quad (3.4)$$

y el estado inicial global es

$$\rho(t=0) = \rho_{\mathcal{S}}(t=0) \otimes \rho_{\mathcal{E}}(t=0) \quad (3.5)$$

con $\rho_{\mathcal{E}}(t=0) = \bigotimes_{\alpha} \rho_{\mathcal{E}_\alpha}(t=0)$.

Este modelo puede describir a un motor realizando cualquier ciclo termodinámico deseado. Un ciclo está compuesto por una secuencia finita de procesos que, o cambian alguna propiedad de la sustancia de trabajo \mathcal{S} (el análogo clásico sería variar el volumen o la presión de un gas, por ejemplo), o la acoplan o desacoplan de algún reservorio \mathcal{E}_α . El primer tipo de procesos, es decir, variar alguna propiedad de \mathcal{S} , se realiza modificando $H_{\mathcal{S}}$. En efecto, variando los elementos diagonales de $V(t)$ (V_{ii}), que suponemos que es τ_d periódico (con τ_d la duración del ciclo completo), uno puede cambiar la frecuencia natural de cada oscilador de \mathcal{S} , y variando los extradiagonales (V_{ij} con $i \neq j$), las interacciones entre ellos. Por otro lado, el segundo tipo de procesos, es decir, el acople y desacople de \mathcal{S} con algún \mathcal{E}_α , requieren de dos pasos:

- Primero, por cada \mathcal{E}_α seleccionamos una porción \mathcal{S}_α de los osciladores de \mathcal{S} que va a estar permanentemente acoplada a \mathcal{E}_α . Ésto se realiza eligiendo correctamente los componentes de la matriz C_α , que es la que almacena las interacciones entre \mathcal{S} y \mathcal{E}_α . Por ejemplo, supongamos que solo los osciladores i_1, i_2, \dots, i_k de \mathcal{S} son los que tienen que estar acoplados a \mathcal{E}_α . En ese caso, los únicos elementos no nulos de C_α serán los $(C_\alpha)_{ij}$ con $i = i_1, i_2, \dots, i_k$ y $j = 1, \dots, N_1$. El resto de los elementos de C_α serán iguales a cero. Los osciladores de \mathcal{S}_α van a estar altamente amortiguados para poder seguir de cerca el estado de \mathcal{E}_α , y van a actuar de eslabones entre \mathcal{E}_α y el resto de \mathcal{S} , que vamos a denotar $\mathcal{S}_{\bar{\alpha}}$ (es decir, en notación de teoría de conjuntos, $\mathcal{S}_{\bar{\alpha}} = \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_\alpha$).
- Y segundo, los acoplamientos entre \mathcal{S}_α y $\mathcal{S}_{\bar{\alpha}}$, que están contenidos en los elementos extradiagonales de $V(t)$, son modificados de forma tal que son o cero o distintos de cero durante algún tiempo deseado. De esta forma podemos desacoplar o acoplar, respectivamente, \mathcal{S}_α de $\mathcal{S}_{\bar{\alpha}}$ y, por lo tanto, \mathcal{S}_α de \mathcal{E}_α (pues los osciladores de \mathcal{S}_α eran

los que hacían de puente entre ellos). Utilizando este método la sustancia de trabajo puede ser efectivamente acoplada o desacoplada de cualquiera de los reservorios. Además, variando la fuerza y el tiempo de la interacción entre \mathcal{S}_α y $\mathcal{S}_{\bar{\alpha}}$ podemos realizar procesos dentro y fuera de equilibrio termodinámico.

En la Fig. 3.1 se muestra un ejemplo de este esquema en el caso particular de dos reservorios.

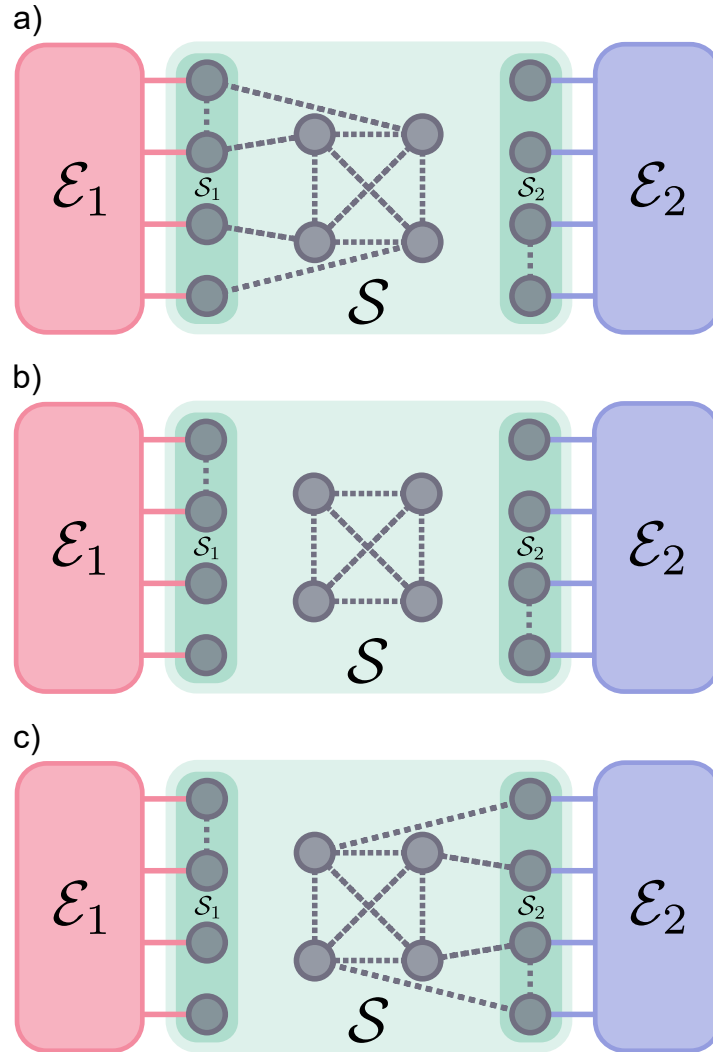


Figura 3.1: Un motor lineal cuya sustancia motora \mathcal{S} está acoplada a dos reservorios \mathcal{E}_1 y \mathcal{E}_2 . \mathcal{S} está compuesta por doce osciladores, donde cuatro de ellos pertenecen a \mathcal{S}_1 y otros cuatro a \mathcal{S}_2 . \mathcal{S}_1 y \mathcal{S}_2 están permanentemente acoplados a \mathcal{E}_1 y \mathcal{E}_2 , respectivamente (líneas sólidas), y temporalmente acoplados al resto de \mathcal{S} (líneas punteadas). a) \mathcal{S} está acoplada a \mathcal{E}_1 mediante \mathcal{S}_1 y efectivamente desacoplada de \mathcal{E}_2 . b) \mathcal{S} está efectivamente desacoplada de ambos reservorios. c) \mathcal{S} está acoplada a \mathcal{E}_2 mediante \mathcal{S}_2 y efectivamente desacoplada de \mathcal{E}_1 .

3.2 Primera ley de la termodinámica

En la sección previa vimos cómo el modelo detallado en el **Capítulo 2** describe un motor cuántico lineal que puede realizar cualquier ciclo termodinámico deseado. El próximo paso es entonces cuantificar el trabajo que puede realizar este motor analizando el calor que intercambia con los reservorios y su variación de energía interna. En esta sección definiremos calor, trabajo y energía para un motor cuántico, daremos sus expresiones explícitas y estudiaremos sus valores medios a tiempos largos. Veremos que sistema y entorno solo intercambian calor mediante paquetes discretos de energía, proporcionales a la frecuencia del potencial externo ω_d , y a través de dos procesos: los resonantes, que transportan excitaciones entre diferentes modos de los reservorios, y los no resonantes, que transforman energía del potencial externo $V(t)$ en excitaciones de modos de los reservorios.

3.2.1 Definiciones de calor, trabajo y energía interna

Las definiciones de calor y trabajo termodinámicos para un sistema cuántico provienen de hacer un análogo con la primera ley de la termodinámica clásica: $\delta W = \delta Q + dU$. Para ello, comenzamos calculando la derivada temporal del valor medio del Hamiltoniano total utilizando la ecuación de Heisenberg (ver Ec. (2.5)):

$$\frac{d}{dt}\langle H(t) \rangle = \langle \partial_t H(t) \rangle. \quad (3.6)$$

Teniendo en cuenta que el único término que depende explícitamente del tiempo es el Hamiltoniano de S a través del potencial externo $V(t)$, y reordenando términos, tenemos:

$$\langle \partial_t H_S(t) \rangle = \frac{d}{dt}\langle H_{\mathcal{E}} \rangle + \frac{d}{dt}(\langle H_S(t) \rangle + \langle H_{S\mathcal{E}} \rangle). \quad (3.7)$$

El lado izquierdo de la Ec. (3.7), que es igual a $\langle \partial_t H(t) \rangle$, da cuenta de la variación de la energía del motor debido a la dependencia temporal explícita del Hamiltoniano y, por lo tanto, se lo asocia con la potencia inyectada por el potencial externo $V(t)$. Entonces, definimos

$$\boxed{\dot{W} \doteq \langle \partial_t H_S(t) \rangle}, \quad (3.8)$$

con W el trabajo hecho sobre el motor (es decir, $W < 0$ significa que el motor está realizando trabajo). Para interpretar el primer término del lado derecho de la Ec. (3.7) miramos la ecuación de Heisenberg correspondiente a $\langle H_{\mathcal{E}} \rangle$:

$$\frac{d}{dt}\langle H_{\mathcal{E}} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [H_{\mathcal{E}}, H_{S\mathcal{E}}] \rangle. \quad (3.9)$$

Como la energía de los reservorios varía solo a causa de la interacción con la sustancia motora, y no hay ninguna dependencia temporal que refleje que se está realizando trabajo sobre éstos, dicha variación se asocia con la derivada respecto del tiempo del calor que fluye hacia \mathcal{E} :

$$\dot{Q}_{\mathcal{E}} \doteq \frac{d}{dt}\langle H_{\mathcal{E}} \rangle. \quad (3.10)$$

Además, usando nuevamente la ecuación de Heisenberg pero ahora para cada uno de los \mathcal{E}_α , podemos identificar las corrientes de calor individuales de cada reservorio,

$$\dot{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} \doteq \frac{d}{dt} \langle H_{\mathcal{E}_\alpha} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [H_{\mathcal{E}_\alpha}, H_{\mathcal{E}} + H_{\mathcal{S}\mathcal{E}}] \rangle, \quad (3.11)$$

tal que $\dot{Q}_{\mathcal{E}} = \sum_{\alpha} \dot{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$. Con las Ecs. (3.8) y (3.11) reescribimos la Ec. (3.7) como

$$\dot{W} = \sum_{\alpha} \dot{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} + \frac{d}{dt} (\langle H_{\mathcal{S}}(t) \rangle + \langle H_{\mathcal{S}\mathcal{E}} \rangle). \quad (3.12)$$

Vemos que del lado izquierdo de la Ec. (3.12) tenemos el trabajo realizado sobre el motor y el primer término del lado derecho corresponde al calor intercambiado entre los reservorios y la sustancia motora (o, más bien, a sus derivadas temporales), por lo que los términos restantes tienen que ser la variación de energía interna U de la sustancia motora. Entonces, definimos

$$U \doteq \langle H_{\mathcal{S}}(t) \rangle + \langle H_{\mathcal{S}\mathcal{E}} \rangle. \quad (3.13)$$

Finalmente, podemos escribir la primera ley de la termodinámica para este motor de la forma

$$\dot{W} = \sum_{\alpha} \dot{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} + \dot{U}. \quad (3.14)$$

3.2.2 Promedio temporal

Nos interesa estudiar el promedio del trabajo producido y del calor intercambiado durante un ciclo termodinámico a tiempos largos, que, como vimos en la **Sección 2.5**, es cuando la sustancia motora está efectivamente trabajando en forma cíclica (que es el tipo de régimen que estamos acostumbrados a estudiar en la termodinámica clásica). Para ello vamos a integrar \dot{W} , $\dot{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$ y \dot{U} en un período a tiempos largos:

$$\begin{aligned} \bar{W} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt \dot{W}(t) \\ \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt \dot{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}(t) \\ \bar{U} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt \dot{U}(t) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Comencemos con la energía interna. Reemplazando la Ec. (3.13), es inmediato que

$$\bar{U} = \lim_{n \rightarrow \infty} [\langle H_{\mathcal{S}}((n+1)\tau_d) \rangle - \langle H_{\mathcal{S}}(n\tau) \rangle] + [\langle H_{\mathcal{S}\mathcal{E}}((n+1)\tau_d) \rangle - \langle H_{\mathcal{S}\mathcal{E}}(n\tau) \rangle]. \quad (3.16)$$

El primer sumando del lado derecho de la Ec. (3.16) se anula porque \mathcal{S} alcanza un régimen estacionario estable a tiempos largos que es τ_d periódico y, entonces, $\langle H_{\mathcal{S}}((n+1)\tau_d) \rangle = \langle H_{\mathcal{S}}(n\tau) \rangle$ para n muy grande. El segundo sumando del lado derecho también se anula, pero la razón no es tan evidente. Para ver esto, vamos a escribir explícitamente $\langle H_{\mathcal{S}\mathcal{E}} \rangle$ y a hacer uso de las ecuaciones de Heisenberg para las coordenadas de \mathcal{S} y \mathcal{E} (Ecs. (2.6) y (2.7)):

$$\begin{aligned} \langle H_{\mathcal{S}\mathcal{E}} \rangle &= \langle X^T \sum_{\alpha} C_{\alpha} q_{\alpha} \rangle \\ &= -\langle X^T [\dot{P} + V(t)X] \rangle. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Vemos que $\langle H_{S\mathcal{E}} \rangle$ también es una función τ_d periódica a tiempos largos, por lo que $\langle H_{S\mathcal{E}} \rangle((n+1)\tau_d) = \langle H_{S\mathcal{E}} \rangle(n\tau)$. Luego, $\bar{U} = 0$ y la primera ley en promedio se reduce a

$$\boxed{\bar{W} = \sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}}. \quad (3.18)$$

Es decir, a tiempos largos, cuando la sustancia motora se encuentra en un régimen periódico, el trabajo producido (o absorbido) por el motor a lo largo de un ciclo es igual al calor total intercambiado con los reservorios durante ese mismo ciclo. Notar que la Ec. (3.18) es completamente análoga a al primera ley de la termodinámica aplicada a un motor cíclico clásico.

3.2.3 Análisis del calor intercambiado

En esta sección vamos a estudiar los procesos físicos elementales subyacentes que dan lugar a $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}$, el calor intercambiado durante un ciclo entre cada uno de los reservorios y la sustancia motora en el estado estacionario asintótico. Con el objetivo de no interrumpir la fluidez de la lectura, aquí solo mostraremos las expresiones relevantes. Las cuentas y demostraciones correspondientes se encuentran detalladas en el **Apéndice A**.

Cada $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}$ puede ser escrito como suma de tres contribuciones con orígenes físicos diferentes:

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}} = \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{ST} + \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^R + \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{NR}, \quad (3.19)$$

donde

- $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{ST}$ corresponde al flujo calor natural que ocurre en ausencia de un potencial externo (y lo llamamos *ST* por estático).
- $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^R$ corresponde a los procesos resonantes, que son responsables por el transporte de excitaciones entre modos de los reservorios debido a la absorción (o emisión) de un paquete de energía desde (o hacia) el potencial externo $V(t)$.
- $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{NR}$ corresponde a los llamados procesos no resonantes, que transforman un paquete de energía del potencial externo $V(t)$ en excitaciones de modos de los reservorios.

Si bien $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{ST}$, $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^R$ y $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{NR}$ tienen orígenes distintos, todos ellos comparten dos características muy importantes. Primero, dependen de una sola propiedad del estado inicial de los reservorios: el valor de expectación del operador número, también llamado número de ocupación, $n_{\alpha}^0(\omega) = \langle a_{\alpha,\omega}^{\dagger} a_{\alpha,\omega} \rangle(t=0)$. Como demostramos en el **Apéndice A**, ninguno de los otros momentos de los operadores $a_{\alpha,\omega}$ y $a_{\alpha,\omega}^{\dagger}$ contribuyen a $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}$. Y segundo, la sustancia motora y los reservorios solo intercambian energía en paquetes discretos de valor $k\hbar\omega_d$ (de ahora en más, k denota un número entero positivo). Estas dos características son las que nos van a permitir derivar todos los resultados que mostramos en este trabajo.

A continuación estudiaremos cada una de las contribuciones por separado.

3.2.3.1 Término estático

Comenzamos analizando el término estático, que es el único presente en ausencia de potencial externo, y cuya expresión es

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST} \doteq \tau_d \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar \omega p_{\alpha,\beta}^{(0)}(\omega) [n_{\beta}^0(\omega) - n_{\alpha}^0(\omega)], \quad (3.20)$$

donde $p_{\alpha,\beta}^{(0)}(\omega) = (\pi/2)\text{tr}[I_{\alpha}(\omega)\tilde{A}_0(i\omega)I_{\beta}(\omega)\tilde{A}_0^{\dagger}(i\omega)]$ es un número adimensional positivo que puede ser interpretado como una tasa de transición por unidad de frecuencia entre dos modos de frecuencia ω , uno en \mathcal{E}_{α} y otro en \mathcal{E}_{β} . Notamos que esta tasa es simétrica,

$$p_{\alpha,\beta}^{(0)}(\omega) = p_{\beta,\alpha}^{(0)}(\omega), \quad (3.21)$$

por lo que ambas transiciones son equiprobables y, en consecuencia, la dirección del flujo de calor entre los reservorios \mathcal{E}_{α} y \mathcal{E}_{β} (es decir, el signo de cada término de la sumatoria en la Ec. (3.20)) depende sólo de la diferencia entre $n_{\alpha}^0(\omega)$ y $n_{\beta}^0(\omega)$. Además, vemos que

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}}^{ST} \doteq \sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST} = 0. \quad (3.22)$$

Es decir, en el estado estacionario no hay intercambio neto de calor entre la sustancia motora y los reservorios debido al término estático. Esto no significa que no haya constantemente intercambio de calor entre la sustancia motora y cada uno de los reservorios individualmente, solo significa que el intercambio neto es nulo. Teniendo en cuenta todo lo anterior, concluimos que $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST}$ corresponde al flujo de calor natural, es decir, que surge solo del contacto (indirecto) entre las partes, entre cada \mathcal{E}_{β} y \mathcal{E}_{α} .

3.2.3.2 Término resonante

El término correspondiente a los procesos resonantes es

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^R = & \tau_d \sum_{k>0,\beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar(\omega + k\omega_d) p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) n_{\beta}^0(\omega) \\ & - \tau_d \sum_{k>0,\beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar(\omega + k\omega_d) p_{\beta,\alpha}^{(-k)}(\omega + k\omega_d) n_{\alpha}^0(\omega + k\omega_d) \\ & + \tau_d \sum_{k>0,\beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar \omega p_{\alpha,\beta}^{(-k)}(\omega + k\omega_d) n_{\beta}^0(\omega + k\omega_d) \\ & - \tau_d \sum_{k>0,\beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar \omega p_{\beta,\alpha}^{(k)}(\omega) n_{\alpha}^0(\omega), \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde $p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) = (\pi/2)\text{tr}[I_{\alpha}(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_k(i\omega)I_{\beta}(\omega)\tilde{A}_k^{\dagger}(i\omega)]$ es un número adimensional positivo que puede ser interpretado como una tasa de transición por unidad de frecuencia entre el modo de frecuencia $\omega + k\omega_d$ en \mathcal{E}_{α} y el modo de frecuencia ω en \mathcal{E}_{β} . Los procesos resonantes producen el transporte de excitaciones entre diferentes modos de los reservorios, debido a la absorción (o emisión) de energía desde (o hacia) el potencial externo $V(t)$. Los

dos primeros términos del lado derecho de la Ec. (3.23) corresponden a procesos opuestos. El primero, siendo positivo, indica que una excitación está siendo transportada desde el modo de frecuencia ω en \mathcal{E}_β hacia el modo de frecuencia $\omega + k\omega_d$ en \mathcal{E}_α , absorbiendo un paquete de energía de valor $k\hbar\omega_d$ del potencial externo. El segundo corresponde al proceso inverso, en el que una excitación está siendo transportada desde el modo de frecuencia $\omega + k\omega_d$ en \mathcal{E}_α hacia el modo de frecuencia ω en \mathcal{E}_β , emitiendo un paquete de energía de valor $k\hbar\omega_d$ al potencial externo. Estos dos términos están representados esquemáticamente en la Fig. 3.2 en color gris. Analogamente, el tercero y cuarto término del lado derecho de la Ec. (3.23) también corresponden a procesos opuestos. El tercero describe una excitación siendo transportada desde el modo de frecuencia $\omega + k\omega_d$ en \mathcal{E}_β hacia el modo de frecuencia ω en \mathcal{E}_α , emitiendo un paquete de energía de valor $k\hbar\omega_d$ al potencial externo. El cuarto, a su vez, describe una excitación siendo transportada desde el modo de frecuencia ω en \mathcal{E}_α hacia el modo de frecuencia $\omega + k\omega_d$ en \mathcal{E}_β , absorbiendo un paquete de energía de valor $k\hbar\omega_d$ del potencial externo. Estos dos últimos términos están representados esquemáticamente en la Fig. 3.2 en color verde.

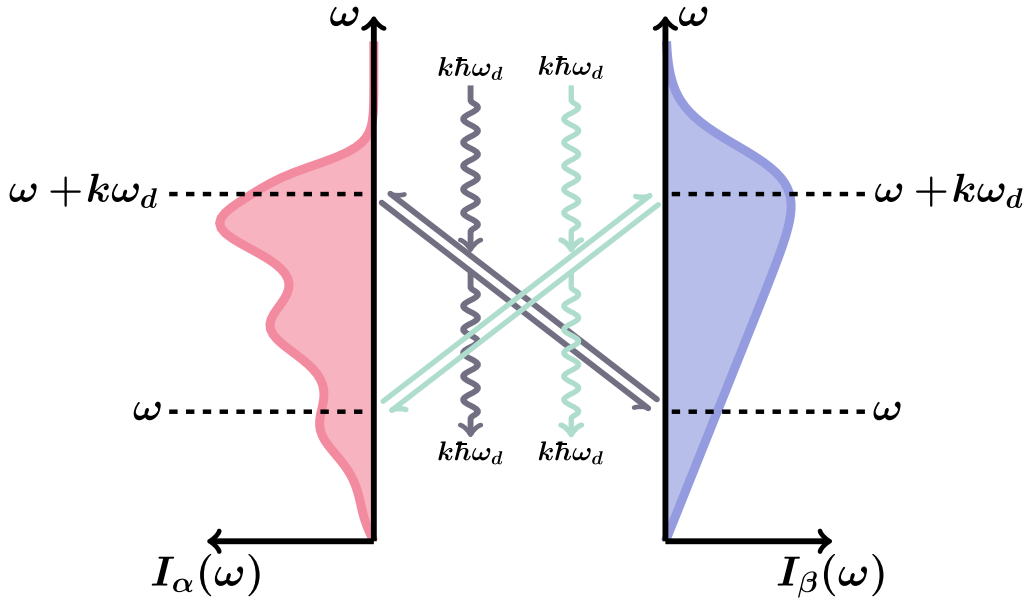


Figura 3.2: Procesos resonantes entre dos entornos \mathcal{E}_α y \mathcal{E}_β .

Notablemente, como mostramos en el **Apéndice A**, las tasas de transición de procesos opuestos son iguales:

$$p_{\beta,\alpha}^{(-k)}(\omega + k\omega_d) = p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega). \quad (3.24)$$

Ésto no es otra cosa más que el principio de balance detallado, que afirma que en equilibrio, cada proceso elemental está en, valga la redundancia, equilibrio con su proceso opuesto. Utilizando la Ec. (3.24) en la Ec. (3.23), podemos escribir a \bar{Q}_α^R como la suma de dos términos:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^R &= \tau_d \sum_{k>0,\beta} \int_0^\infty d\omega \hbar(\omega + k\omega_d) p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) [n_\beta^0(\omega) - n_\alpha^0(\omega + k\omega_d)] \\ &\quad - \tau_d \sum_{k>0,\beta} \int_0^\infty d\omega \hbar\omega p_{\beta,\alpha}^{(k)}(\omega) [n_\alpha^0(\omega) - n_\beta^0(\omega + k\omega_d)]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

La Ec. (3.25) muestra que, a pesar de que la tasa de transición es la misma para procesos opuestos, hay un flujo neto de excitaciones en la dirección en la cual el número de ocupación es menor. Por ejemplo, si $n_\beta^0(\omega) > n_\alpha^0(\omega + k\omega_d)$ en el primer término de lado derecho de la Ec. (3.25), entonces el transporte neto de excitaciones es desde el modo de frecuencia ω en \mathcal{E}_β hacia el modo de frecuencia $\omega + k\omega_d$ en \mathcal{E}_α , absorbiendo un paquete de energía $k\hbar\omega_d$ del potencial externo en el proceso.

La suma de todos los $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^R$ puede ser escrita como

$$\bar{Q}^R = \tau_d \sum_{\alpha, \beta} \sum_{k>0} k\hbar\omega_d \int_0^\infty d\omega p_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) [n_\beta^0(\omega) - n_\alpha^0(\omega + k\omega_d)], \quad (3.26)$$

que muestra que, en total, hay un intercambio neto de paquetes de energía $k\hbar\omega_d$ entre distintos modos de los reservorios en el sentido dado por la diferencia entre sus números de ocupación.

3.2.3.3 Término no resonante

La contribución de los procesos no resonantes puede ser escrita como

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{NR} = & \tau_d \sum_{k>0, \beta} \int_0^{k\omega_d} d\omega \hbar(k\omega_d - \omega) \tilde{p}_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) [n_\beta^0(\omega) + 1/2] \\ & + \tau_d \sum_{k>0, \beta} \int_0^{k\omega_d} d\omega \hbar\omega \tilde{p}_{\beta, \alpha}^{(k)}(\omega) [n_\alpha^0(\omega) + 1/2] \end{aligned}, \quad (3.27)$$

donde $\tilde{p}_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) = (\pi/2)\text{tr}[I_\alpha(k\omega_d - \omega)\tilde{A}_{-k}(i\omega)I_\beta(\omega)\tilde{A}_{-k}^\dagger(i\omega)]$ es un número adimensional positivo que puede ser interpretado como una tasa de emisión por unidad de frecuencia desde el potencial externo $V(t)$ hacia excitaciones en los reservorios, una en el modo de frecuencia $k\omega_d - \omega$ en \mathcal{E}_α y otra en el modo de frecuencia ω en \mathcal{E}_β . En estos procesos, un paquete de energía del potencial externo de valor $k\hbar\omega$ se divide y crea un par de excitaciones en los reservorios, una con energía $\hbar(k\omega_d - \omega)$ y la otra con energía $\hbar\omega$, de modo que, por conservación de la energía, su suma sea igual a $k\hbar\omega_d$. El primer término del lado derecho de la Ec. (3.27), representado esquemáticamente en la Fig. 3.3 en color gris, corresponde al caso en el que el modo de frecuencia $k\omega_d - \omega$ es excitado en \mathcal{E}_α , mientras que el modo de frecuencia ω es excitado en \mathcal{E}_β . Análogamente, el segundo término del lado derecho de la Ec. (3.27), representado esquemáticamente en la Fig. 3.3 en color verde, corresponde al caso opuesto, en el que el modo de frecuencia ω es excitado en \mathcal{E}_α y el modo de frecuencia $k\omega_d - \omega$ es excitado en \mathcal{E}_β . En contraposición a $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST}$ y $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^R$, en estos procesos las excitaciones no son transferidas entre modos del entorno, sino que son creadas de a pares a partir de la energía brindada por el potencial externo.

Los procesos no resonantes tienen como característica peculiar que producen intercambio de calor incluso si $n_\alpha^0(\omega) = 0$, mientras que $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST}$ y $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^R$ ambos se anularían. En el caso de reservorios térmicos en el que $n_\alpha^0(\omega) = [e^{\hbar\omega/k_B T_\alpha} - 1]^{-1}$, ésto corresponde a poder intercambiar calor a temperatura igual a cero. Es decir, a bajos números de ocupación, la creación de pares de excitación, que es un proceso puramente cuántico, domina la transferencia de calor entre sustancia motora y reservorios. De hecho, debido a que $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{NR} > 0$, el sentido del

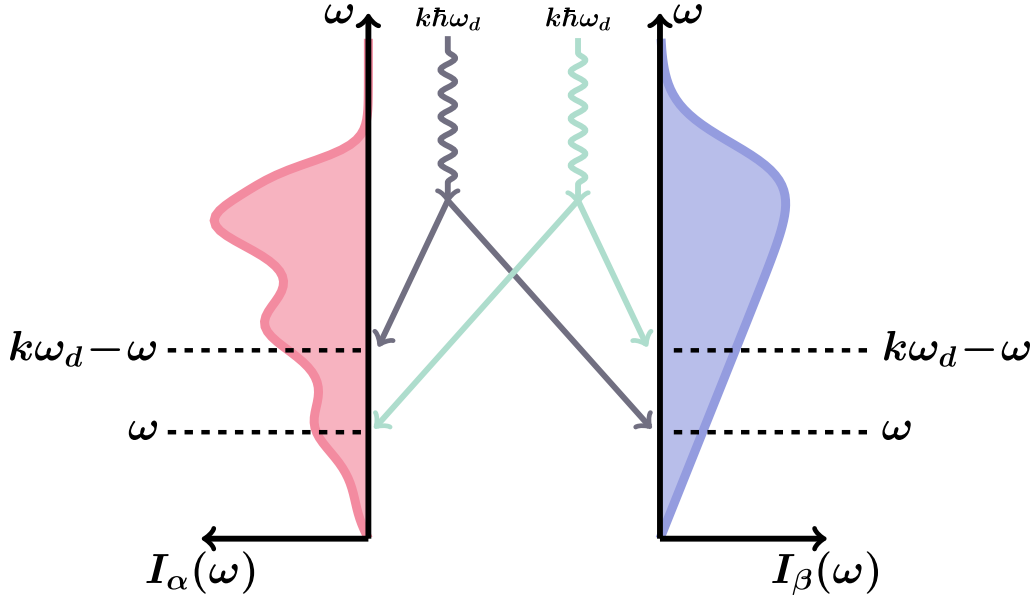


Figura 3.3: Procesos no resonantes entre dos entornos \mathcal{E}_α y \mathcal{E}_β .

intercambio de energía es siempre desde el potencial externo hacia los reservorios. Entonces, podríamos decir que estos procesos constantemente *calientan* a los reservorios y, por ello, cumplen un rol fundamental en la formulación de Nernst de la tercera ley de la termodinámica [47].

La suma de todos los $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{NR}$ se puede escribir como

$$\bar{Q}^{NR} = \tau_d \sum_{\alpha, \beta} \sum_{k>0} k\hbar\omega_d \int_0^{k\omega_d} d\omega \tilde{p}_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) [n_\beta^0(\omega) + 1/2], \quad (3.28)$$

dejando así en evidencia que, como resultado final, en cada ciclo termodinámico, paquetes de energía de valor $k\hbar\omega_d$ son inyectados desde el potencial externo hacia los reservorios.

3.2.4 Trabajo y eficiencia

En esta sección vamos a estudiar la relación entre el trabajo producido por el motor y su eficiencia, y los procesos elementales descritos en la **Sección 3.2.3**, que dan origen al intercambio de calor entre la sustancia motora y los reservorios.

Según la Ec. (3.18) y lo visto en la **Sección 3.2.3**, el trabajo total producido por el motor durante un ciclo en el estado estacionario se puede escribir como

$$\bar{W} = \bar{Q}^R + \bar{Q}^{NR}, \quad (3.29)$$

donde recordamos que \bar{Q}^R y \bar{Q}^{NR} son las contribuciones de los términos resonantes y no resonantes, respectivamente, y el término estático no aparece pues la suma de todos los $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST}$ se anula. Debido a que \bar{Q}^{NR} es siempre positivo, los procesos resonantes son los responsables de que el motor pueda realizar trabajo: como necesitamos que $\bar{W} < 0$, una condición necesaria pero no suficiente es $\bar{Q}^R < 0$. Podemos encontrar una condición análoga a la que

conocemos de termodinámica clásica de la siguiente forma. Si bien cada $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$ tiene un signo definido, lo que significa que hay un intercambio neto de calor entre la sustancia motora y el reservorio \mathcal{E}_α en algún sentido dado por el signo de $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$, cada modo dentro del entorno puede realizar un intercambio de calor en ese mismo sentido o no. Es decir, si cada modo en \mathcal{E}_α de frecuencia ω contribuye un $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha,\omega}$ al calor total, de forma tal que

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} = \int d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha,\omega} = \int_0^\infty \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}}{d\omega} d\omega, \quad (3.30)$$

donde $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}/d\omega$ es el integrando de la Ec. (A.29), por más que $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$ tenga un signo definido, $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}/d\omega$ no necesariamente tiene el mismo para cada modo de frecuencia ω . Entonces, adelantándonos a lo que veremos en la **Sección 3.3.2**, vamos a considerar cada modo del entorno como un entorno en sí mismo y vamos a diferenciar el calor que fluye desde la sustancia motora hacia el reservorio \mathcal{E}_α del que fluye en el sentido inverso mirando al calor intercambiado por cada modo de forma individual. Para ello, dividimos a $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}/d\omega$ en su parte positiva y su parte negativa:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+}{d\omega} &\doteq \text{máx}\{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}/d\omega, 0\} \\ \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^-}{d\omega} &\doteq \text{máx}\{-d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}/d\omega, 0\} \end{aligned} \quad (3.31)$$

La parte positiva de $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}/d\omega$, $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+/d\omega$, corresponde al conjunto de modos cuyo calor intercambiado fluye desde la sustancia motora a \mathcal{E}_α , y la parte negativa, $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^-/d\omega$, corresponde al conjunto de modos cuyo calor intercambiado fluye en sentido inverso, desde \mathcal{E}_α hacia la sustancia motora. Notamos que $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}/d\omega = d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+/d\omega - d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^-/d\omega$ y, por lo tanto, podemos definir

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+ &\doteq \int_0^\infty \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+}{d\omega} d\omega \\ \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^- &\doteq \int_0^\infty \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^-}{d\omega} d\omega \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+$ es el calor neto (es decir, incluyendo todos los modos del entorno) que fluye desde la sustancia motora a \mathcal{E}_α , y $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^-$ al calor que fluye en el sentido opuesto, de modo que $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} = \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+ - \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^-$. Recordando lo analizado en la **Sección 3.2.3**, podemos concluir que los procesos no resonantes sólo contribuyen a $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+$ (pues al crear pares de excitación la transferencia de energía ocurre desde el potencial externo hacia los reservorios), mientras que los resonantes contribuyen a $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+$ y $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^-$. Finalmente, agrupamos los calores de todos los reservorios:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow S} &= \sum_\alpha \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^+ \\ \bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S} &= \sum_\alpha \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^- \end{aligned} \quad (3.33)$$

donde definimos a $\bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow S}$ que, como es la suma de todas las partes positivas de los $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$, es el calor neto que fluye de la sustancia motora a los reservorios, y a $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S}$ que, como es la suma de todas las partes negativas de los $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$, es el calor neto que fluye de los reservorios a la sustancia motora. Entonces, podemos escribir la Ec. (3.29) de la forma

$$\boxed{\bar{W} = \bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow S} - \bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S}}. \quad (3.34)$$

Luego, la condición necesaria y suficiente para que el motor realice trabajo es

$$\boxed{\bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{S}} < \bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}}. \quad (3.35)$$

Es decir, el motor realiza trabajo si y sólo si el calor que fluye de los reservorios hacia la sustancia motora, que es sólo debido a los procesos resonantes, es mayor que el calor que fluye de la sustancia motora hacia los reservorios, que incluye la contribución de los dos tipos de procesos, resonantes y no resonantes.

La eficiencia del motor η está definida como el cociente entre el trabajo realizado por éste y el costo energético para producirlo. Vamos a calcular la eficiencia promedio del motor durante un ciclo, que es el trabajo promedio realizado durante ese ciclo dividido la energía promedio necesaria para realizarlo (notar que esto es el cociente de dos promedios, y no el promedio del cociente). Debido a que $\bar{W} < 0$, el numerador es entonces $|\bar{W}| = \bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}} - \bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{S}}$. Por otro lado, el denominador, que es la energía necesaria para que el motor funcione, es el calor neto que fluye de los reservorios a la sustancia motora, que arriba identificamos como $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}$. Entonces, podemos escribir la siguiente expresión exacta para η :

$$\boxed{\eta = \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}} - \bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{S}}}{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}}. \quad (3.36)$$

Notamos que el efecto de los procesos no resonantes, que está completamente incluido en $\bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{S}}$, es siempre perjudicial para la eficiencia del motor. A simple vista, uno diría se está desperdiciando energía del potencial externo en crear pares de excitaciones en vez de realizar trabajo útil pero, como veremos en el **Capítulo 4**, esa energía no es inyectada en el entorno y disipada sin más, sino que es utilizada para generar correlaciones no clásicas, como entrelazamiento.

En la **Sección 3.4**, utilizando la desigualdad de Clausius, mostraremos una cota general para la eficiencia de la Ec. (3.36) que en el caso de reservorios térmicos se reduce a la eficiencia de Carnot.

3.3 Segunda ley de la termodinámica

En esta sección vamos a estudiar los dos enunciados mas comunes de la segunda ley de la termodinámica en el contexto de los motores clásicos y cuánticos: el enunciado de Kelvin-Planck y la desigualdad de Clausius, que es la forma matemática que eligió Clausius para enunciar la segunda ley [53]. Al final de esta sección mostraremos la equivalencia entre estos dos enunciados en el caso de reservorios térmicos. El enunciado original de Carnot lo vamos a dejar para la **Sección 3.4**, cuando ya hayamos probado la desigualdad de Clausius y una cota generalizada para la eficiencia de los motores cuánticos lineales.

3.3.1 Enunciado de Kelvin-Planck

El enunciado clásico de Kelvin-Planck de la segunda ley de la termodinámica dice: *es imposible construir un motor cíclico que solo absorba calor de un reservorio térmico y produzca una cantidad equivalente de trabajo*. Veamos cómo se manifiesta esto en los motores que

estamos estudiando. Recordamos que el trabajo producido por un motor cuántico lineal durante un ciclo está dado por

$$\bar{W} = \bar{Q}^R + \bar{Q}^{NR}, \quad (3.37)$$

más la condición $\bar{W} < 0$, que significa que podemos extraer trabajo de él. Como el término correspondiente a los procesos no resonantes, \bar{Q}^{NR} , es siempre positivo, para poder extraer trabajo ciclicamente de nuestro motor necesitamos que $\bar{Q}^R < 0$ (esta condición es necesaria pero no suficiente). Vamos a considerar una condición más general a tener un solo reservorio, que es que *todos los reservorios hayan sido preparados en estados iniciales con el mismo número de ocupación* $n^0(\omega)$. Estrictamente, tener un solo reservorio significaría que no haya *ninguna* diferencia entre los estados iniciales de los distintos \mathcal{E}_α . Acá estamos permitiendo que los reservorios tengan diferentes densidades espectrales y estados iniciales, siempre y cuando $n^0(\omega)$ sea el mismo para todos ellos. En ese caso, el calor intercambiado por los procesos resonantes \bar{Q}^R está dado por

$$\bar{Q}^R = \tau_d \sum_{\alpha, \beta} \sum_{k>0} k\hbar\omega_d \int_0^\infty d\omega p_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) [n^0(\omega) - n^0(\omega + k\omega_d)]. \quad (3.38)$$

Entonces, vemos que $\bar{Q}^R < 0$ implica que $n^0(\omega)$ no es una función decreciente de ω (recordamos que las tasas $p_{\alpha, \beta}^{(k)}$ son positivas). Por lo tanto, la generalización del enunciado de Kelvin-Planck sería: *no se puede extraer trabajo ciclicamente de un conjunto de reservorios que fueron inicialmente preparados en estados con el mismo número de ocupación si ese número de ocupación es una función decreciente de la frecuencia, sin importar cómo sean sus densidades espectrales*. Por otro lado, si $n^0(\omega)$ no es una función decreciente de ω , lo que significa que hay inversión de población para al menos algunos modos, los reservorios se vuelven termodinámicamente inestables y tienen tendencia a liberar energía que puede ser transformada en trabajo útil.

En la **Sección 3.3.3** vamos a estudiar la equivalencia entre el enunciado generalizado de Kelvin-Planck y la desigualdad de Clausius.

3.3.2 Desigualdad de Clausius generalizada

En esta sección vamos a demostrar una desigualdad de Clausius generalizada (es decir, para reservorios no necesariamente térmicos) para la clase de motores cuánticos lineales:

$$\sum_{\alpha} \int_0^\infty \frac{1}{\mathcal{T}_\alpha(\omega)} \frac{d\bar{Q}_\alpha}{d\omega} d\omega \geq 0, \quad (3.39)$$

donde $\mathcal{T}_\alpha(\omega)$ es una temperatura local, que es una temperatura efectiva para cada modo del reservorio que solo depende de su frecuencia y del valor inicial del número de ocupación $n_\alpha^0(\omega)$. La desigualdad de Clausius no solo es la forma matemática en la que Clausius enunció la segunda ley de la termodinámica [53], sino que es una herramienta increíblemente útil que nos va a permitir demostrar una cota generalizada para la eficiencia de los motores que estamos estudiando en la **Sección 3.4**.

A continuación vamos a motivar la definición de $\mathcal{T}_\alpha(\omega)$ y luego vamos a demostrar la desigualdad de Clausius. Antes de seguir queremos remarcar que, en el caso particular de reservorios térmicos en el que

$$n_\alpha^0(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T_\alpha} - 1}, \quad (3.40)$$

con T_α la temperatura termodinámica de \mathcal{E}_α , la temperatura local $\mathcal{T}_\alpha(\omega)$ es igual a T_α (independientemente del valor de ω) y la desigualdad de Clausius generalizada se reduce a la ya conocida:

$$\sum_\alpha \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}}{T_\alpha} \geq 0. \quad (3.41)$$

3.3.2.1 Temperatura local

En esta sección vamos a introducir el concepto de temperatura local, que, como mencionamos anteriormente, es una temperatura efectiva que se le puede asignar a cada modo del entorno, que solo depende de su frecuencia y de $n_\alpha^0(\omega)$. Para ello consideremos el caso más sencillo no trivial del modelo que venimos utilizando hasta ahora: un sistema \mathcal{S} constituido por un solo oscilador con $V(t) = M\omega_S^2$ independiente del tiempo, y debilmente acoplado a un entorno \mathcal{E} no necesariamente térmico. Éste es el modelo arquetípico de movimiento Browniano cuántico pero donde permitimos que el entorno sea no térmico. Vamos a ver que el estado asintótico del oscilador se puede interpretar como un estado térmico cuya temperatura solo depende de ω_S y del valor medio inicial del operador número correspondiente a \mathcal{E} , n^0 . Esta observación es la idea detrás del concepto de temperatura local.

Según los cálculos que hicimos en la **Sección 2.5**, y suponiendo nuevamente que el estado inicial del oscilador es Gaussiano, su estado asintótico está caracterizado por una matriz de covariancia cuyos componentes, correctamente adimensionalizados, son

$$\begin{aligned} \langle \{X(t), X(t)\} \rangle &\longrightarrow M\omega_r \int_0^\infty d\omega I(\omega) |\tilde{g}(i\omega)|^2 [2n^0(\omega) + 1] \\ \langle \{P(t), P(t)\} \rangle &\longrightarrow \frac{M}{\omega_r} \int_0^\infty d\omega \omega^2 I(\omega) |\tilde{g}(i\omega)|^2 [2n^0(\omega) + 1] \\ \langle \{X(t), P(t)\} \rangle &\longrightarrow 0 \end{aligned} \quad (3.42)$$

donde recordamos que $\tilde{g}(s) = [M(s^2 + \omega_r^2) + s\tilde{\gamma}(s)]^{-1}$ era la transformada de Laplace de la función de Green del problema estático. Utilizando la identidad demostrada en la **Sección 2.3.3**,

$$\text{Im}[\tilde{g}^{-1}(i\omega)] = \frac{\pi}{2} I(\omega), \quad (3.43)$$

podemos escribir las componentes no nulas de la matriz de covariancia dadas en la Ec. (3.42) como

$$\begin{aligned} \langle \{X(t), X(t)\} \rangle &\longrightarrow \frac{2}{\pi} M\omega_r \text{Im} \left\{ \int_0^\infty d\omega \tilde{g}^*(i\omega) [2n^0(\omega) + 1] \right\} \\ \langle \{P(t), P(t)\} \rangle &\longrightarrow \frac{2}{\pi} \frac{M}{\omega_r} \text{Im} \left\{ \int_0^\infty d\omega \omega^2 \tilde{g}^*(i\omega) [2n^0(\omega) + 1] \right\} \end{aligned} \quad (3.44)$$

con \tilde{g}^* el complejo conjugado de \tilde{g} . Las expresiones en la Ec. (3.44) son exactas y sirven para cualquier densidad espectral. Para seguir, consideramos el límite de acoplamiento débil en el que $\gamma_0 \rightarrow 0$ y, por lo tanto, $\tilde{g}(i\omega) \rightarrow 1/M(\omega_S^2 - \omega^2)$. Entonces,

$$\begin{aligned} \langle \{X(t), X(t)\} \rangle &\longrightarrow \frac{2}{\pi} \omega_S \text{Im} \left[\int_0^\infty d\omega \frac{2n^0(\omega) + 1}{\omega_S^2 - \omega^2} \right] \\ \langle \{P(t), P(t)\} \rangle &\longrightarrow \frac{2}{\pi} \frac{1}{\omega_S} \text{Im} \left[\int_0^\infty d\omega \omega^2 \frac{2n^0(\omega) + 1}{\omega_S^2 - \omega^2} \right] \end{aligned} \quad (3.45)$$

Utilizando la formula integral de Cauchy para resolver las integrales, llegamos a las expresiones finales para los elementos de la matriz de covariancia asintótica de \mathcal{S} :

$$\begin{cases} \langle \{X(t), X(t)\} \rangle \longrightarrow 2n^0(\omega_{\mathcal{S}}) + 1 \\ \langle \{P(t), P(t)\} \rangle \longrightarrow 2n^0(\omega_{\mathcal{S}}) + 1 \\ \langle \{X(t), P(t)\} \rangle \longrightarrow 0 \end{cases} \quad (3.46)$$

Es decir, si acoplamos debilmente un oscilador a un entorno, a tiempos largos éste termina copiando el estado inicial del entorno salvo por los elementos extra diagonales de la matriz de covariancia, que pasan a ser nulos. Podemos interpretar esta situación de otra forma: si un observador que no conoce el estado del entorno mide el estado del oscilador, como ve una matriz de covariancia escalar, podría pensar que éste alcanzó un estado térmico a cierta temperatura $\mathcal{T}_{\mathcal{S}}$ (es decir, termalizó). De este modo, le asignaría una matriz térmica como matriz de covariancia:

$$\sigma_{\mathcal{S}}(t) \longrightarrow \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega_{\mathcal{S}}}{2k_B\mathcal{T}_{\mathcal{S}}}\right) \mathbb{1}, \quad (3.47)$$

que se corresponde con el estado térmico

$$\rho_{\mathcal{S}} = \frac{1}{Z_{\mathcal{S}}} e^{-H_{\mathcal{S}}/k_B\mathcal{T}_{\mathcal{S}}}, \quad (3.48)$$

donde la temperatura $\mathcal{T}_{\mathcal{S}}$ está relacionada con $n^0(\omega_{\mathcal{S}})$ mediante

$$\coth\left(\frac{\hbar\omega_{\mathcal{S}}}{2k_B\mathcal{T}_{\mathcal{S}}}\right) = 2n^0(\omega_{\mathcal{S}}) + 1. \quad (3.49)$$

Teniendo en mente lo anterior, a cada modo de frecuencia ω de un entorno \mathcal{E}_{α} con valor medio inicial del operador número dado por $n_{\alpha}^0(\omega)$ podemos asignarle una temperatura local $\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)$ mediante la relación

$$\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)}\right) = 2n_{\alpha}^0(\omega) + 1. \quad (3.50)$$

Definida así, $\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)$ es la temperatura efectiva que alcanzaría un oscilador de frecuencia ω debilmente acoplado a un entorno continuo cuyos osciladores tienen un valor medio inicial del operador número dado por la función n_{α}^0 . Es decir, su matriz de covariancia asintótica sería

$$\sigma_{\alpha,\omega}(t) \longrightarrow \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)}\right) \mathbb{1}, \quad (3.51)$$

y, por lo tanto, su matriz densidad reducida,

$$\rho_{\alpha,\omega}(t) \longrightarrow \frac{1}{Z_{\alpha,\omega}} e^{-H_{\alpha,\omega}/k_B\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)}. \quad (3.52)$$

A continuación detallamos algunas propiedades de la temperatura local que pueden ser derivadas de la Ec. (3.50) y que refuerzan la idea que $\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)$ es una buena elección para una temperatura efectiva:

- **Unicidad.** La temperatura local está definida unívocamente mediante la Ec. (3.50):

$$\mathcal{T}_\alpha(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2k_B \operatorname{arccoth}[2n_\alpha^0(\omega) + 1]}. \quad (3.53)$$

Debido a que $n_\alpha^0(\omega) \geq 0$, el lado derecho de la Ec. (3.50) es mayor o igual a uno. Utilizando que la cotangente hiperbólica es invertible en el intervalo $(1, +\infty)$, llegamos a la igualdad deseada.

- **Positividad.** La temperatura local es siempre positiva:

$$\mathcal{T}_\alpha(\omega) \geq 0. \quad (3.54)$$

Debido a que $n_\alpha^0(\omega) \geq 0$, el lado izquierdo de la Ec. (3.50) es mayor o igual a uno y, como ω es positiva, concluimos que $\mathcal{T}_\alpha(\omega) \geq 0$.

- **Estado fundamental.** Temperatura local igual a cero indica el estado fundamental:

$$\mathcal{T}_\alpha(\omega) = 0 \Leftrightarrow n_\alpha^0(\omega) = 0. \quad (3.55)$$

Si $\mathcal{T}_\alpha(\omega) \rightarrow 0^+$, entonces $\operatorname{coth}(\hbar\omega/2k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega)) \rightarrow 1^-$ y, necesariamente, $n_\alpha^0(\omega) \rightarrow 0^+$. Por el contrario, si $n_\alpha^0(\omega) \rightarrow 0^+$, entonces $\operatorname{coth}(\hbar\omega/2k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega)) \rightarrow 1^-$ y $\mathcal{T}_\alpha(\omega) \rightarrow 0^+$.

- **Estado térmico.** La temperatura local coincide con la temperatura termodinámica en el caso de un reservorio térmico:

$$\mathcal{T}_\alpha(\omega) = T_\alpha \Leftrightarrow n_\alpha^0(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T_\alpha} - 1}. \quad (3.56)$$

Si $\mathcal{T}_\alpha(\omega) = T_\alpha$, entonces, usando la identidad $\operatorname{coth}(x/2) = 2/(e^x - 1) + 1$, concluimos que $n_\alpha^0(\omega) = [\exp(\hbar\omega/k_B T_\alpha) - 1]^{-1}$. Por el contrario, si $n_\alpha^0(\omega) = [\exp(\hbar\omega/k_B T_\alpha) - 1]^{-1}$, usando la misma identidad que antes, se llega a que $\mathcal{T}_\alpha(\omega) = T_\alpha$. De hecho, este es el único caso en la que temperatura local no depende de la frecuencia:

$$\frac{\partial \mathcal{T}_\alpha}{\partial \omega} = 0 \Leftrightarrow n_\alpha^0(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T_\alpha} - 1}. \quad (3.57)$$

Si $n_\alpha^0(\omega) = [\exp(\hbar\omega/k_B T_\alpha) - 1]^{-1}$, ya vimos que $\mathcal{T}_\alpha(\omega) = T_\alpha$ y, por lo tanto, $\partial \mathcal{T}_\alpha / \partial \omega = 0$. Por el contrario, derivando a ambos lados de la Ec. (3.50) y usando que $\partial \mathcal{T}_\alpha / \partial \omega = 0$, llegamos a $2\partial n_\alpha^0 / \partial \omega = -\hbar/2k_B T_\alpha \sinh^2(\hbar\omega/2k_B T_\alpha)$, que tiene como solución $n_\alpha^0(\omega) = [\exp(\hbar\omega/k_B T_\alpha) - 1]^{-1} + \text{cte}$. Fijando que $n_\alpha^0(\omega = 0) = 0$, concluimos que $\text{cte} = 0$ y obtenemos el resultado deseado.

- **Monotonidad.** El cociente $\mathcal{T}_\alpha(\omega)/\omega$ es creciente o decreciente como función de ω según $n_\alpha^0(\omega)$ sea creciente o decreciente, respectivamente:

$$\operatorname{sgn} \left[\frac{\partial}{\partial \omega} \left(\frac{\mathcal{T}_\alpha(\omega)}{\omega} \right) \right] = \operatorname{sgn} \left(\frac{\partial n_\alpha^0}{\partial \omega} \right). \quad (3.58)$$

En particular, n_α^0 es una función creciente de ω si y solo si \mathcal{T}_α también lo es y, además, \mathcal{T}_α crece más rápido que una función lineal. En cambio, si n_α^0 es una función decreciente, \mathcal{T}_α puede ser también decreciente o puede ser creciente y crecer más lento que una función lineal. Derivando a ambos lados de la Ec. (3.50) obtenemos $-\hbar[\partial(\omega/\mathcal{T}_\alpha(\omega))/\partial\omega]/2k_B T_\alpha \sinh^2(\hbar\omega/2k_B T_\alpha) = 2\partial n_\alpha^0/\partial\omega$. Usando que $\partial(\mathcal{T}_\alpha(\omega)/\omega)/\partial\omega = -[\mathcal{T}_\alpha(\omega)/\omega]^2[\partial(\omega/\mathcal{T}_\alpha(\omega))/\partial\omega]$ en la igualdad anterior, vemos que las funciones $\partial n_\alpha^0/\partial\omega$ y $\partial(\mathcal{T}_\alpha(\omega)/\omega)/\partial\omega$ tienen el mismo signo.

- **Comportamiento asintótico.** Para $n_\alpha^0(\omega) \gg 1$, la temperatura local se puede aproximar como

$$\mathcal{T}_\alpha(\omega) \simeq \frac{\hbar\omega}{k_B} n_\alpha^0(\omega), \quad (3.59)$$

mientras que para $n_\alpha^0(\omega) \ll 1$, tenemos

$$\mathcal{T}_\alpha(\omega) \simeq \frac{\hbar\omega}{k_B \ln[1/n_\alpha^0(\omega)]}. \quad (3.60)$$

Inviertiendo la Ec. (3.50) y usando que $\operatorname{arcoth}(x) = \ln[(x+1)/(x-1)]/2$, se obtienen ambos límites.

3.3.2.2 Demostración de la desigualdad de Clausius

Ahora que vimos que a cada modo del entorno se le puede asignar una temperatura de una forma físicamente razonable, podemos pasar a la demostración de la desigualdad de Clausius. Primero vamos a demostrar la positividad de la producción de entropía, y luego vamos a relacionar la entropía con el calor intercambiado para obtener la desigualdad deseada. Para ello, comenzamos considerando que los reservorios son discretos (es decir, que cada \mathcal{E}_α está compuesto de N_α osciladores) y al final vamos a pasar al límite continuo.

Debido a que la evolución temporal del estado global $\rho_{S\mathcal{E}}$ es unitaria, la entropía de von Neumann total $S_{S\mathcal{E}}(t) = -\operatorname{tr}\{\rho_{S\mathcal{E}}(t)\ln[\rho_{S\mathcal{E}}(t)]\}$ se conserva:

$$\Delta S_{S\mathcal{E}}(t) = S_{S\mathcal{E}}(t) - S_{S\mathcal{E}}(0) = 0. \quad (3.61)$$

Como $S_{S\mathcal{E}}$ es subaditiva, tenemos la siguiente cadena de desigualdades:

$$S_{S\mathcal{E}}(t) \leq S_S(t) + S_{\mathcal{E}}(t) \leq S_S(t) + \sum_\alpha S_{\mathcal{E}_\alpha}(t) \leq S_S(t) + \sum_\alpha \sum_i S_{\alpha,i}(t), \quad (3.62)$$

donde $S_{\alpha,i}$ corresponde a la entropía del i -ésimo oscilador del reservorio \mathcal{E}_α . Además, el estado inicial es un estado producto entonces vale que

$$S_{S\mathcal{E}}(0) = S_S(0) + \sum_\alpha \sum_i S_{\alpha,i}(0). \quad (3.63)$$

Si combinamos las Ecs. (3.61), (3.62) y (3.63), llegamos a que la suma de la producción de la entropías individuales es positiva:

$$\Delta S_S(t) + \sum_\alpha \sum_i \Delta S_{\alpha,i}(t) \geq 0. \quad (3.64)$$

La Ec. (3.64) es exacta y vale para todo tiempo. A nosotros nos va a interesar el límite a tiempos largos, pero antes debemos relacionar $S_{\alpha,i}$ con el calor intercambiado entre éste y la sustancia motora. Para ello vamos a definir el estado de equilibrio térmico $\rho_{\alpha,i}^{th} \doteq \exp[-H_{\mathcal{E}_{\alpha,i}}/k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega_i)]/Z_{\alpha,i}$, que corresponde al i -ésimo oscilador del reservorio \mathcal{E}_α , y escribamos su entropía como

$$\begin{aligned} S_{\alpha,i}(t) &= -\text{tr}[\rho_{\alpha,i}(t)\ln(\rho_{\alpha,i}^{th})] - \left\{ \text{tr}\{\rho_{\alpha,i}(t)\ln[\rho_{\alpha,i}(t)]\} - \text{tr}[\rho_{\alpha,i}(t)\ln(\rho_{\alpha,i}^{th})] \right\} \\ &= \frac{1}{k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega_i)} \langle H_{\mathcal{E}_{\alpha,i}} \rangle(t) + \frac{1}{k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega_i)} \ln(Z_{\alpha,i}) - D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(t) || \rho_{\alpha,i}^{th}), \end{aligned} \quad (3.65)$$

donde $D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(t) || \rho_{\alpha,i}^{th})$ es la divergencia de Kullback-Leibler o también llamada entropía relativa entre $\rho_{\alpha,i}(t)$ y $\rho_{\alpha,i}^{th}$. Por lo tanto, la variación de entropía es

$$\begin{aligned} \Delta S_{\alpha,i}(t) &= \frac{1}{k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega_i)} \Delta \langle H_{\mathcal{E}_{\alpha,i}} \rangle(t) + D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(0) || \rho_{\alpha,i}^{th}) - D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(t) || \rho_{\alpha,i}^{th}) \\ &\leq \frac{\Delta Q_{\mathcal{E}_{\alpha,i}}(t)}{k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega_i)} + D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(0) || \rho_{\alpha,i}^{th}), \end{aligned} \quad (3.66)$$

donde en la última desigualdad usamos que el valor medio del Hamiltoniano del i -ésimo oscilador del reservorio \mathcal{E}_α es simplemente el calor intercambiado, como vimos en la **Sección 3.2**, y que la divergencia de Kullback-Leibler es siempre una cantidad positiva. Reemplazando el resultado de la Ec. (3.66) en la Ec. (3.64), llegamos a

$$\Delta S_S(t) + \sum_\alpha \sum_i \frac{\Delta Q_{\mathcal{E}_{\alpha,i}}(t)}{k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega_i)} + \sum_\alpha \sum_i D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(0) || \rho_{\alpha,i}^{th}) \geq 0. \quad (3.67)$$

Ahora vamos a pasar al límite continuo. Para ello notamos que, cuando antes cada oscilador discreto contribuía con un $Q_{\mathcal{E}_{\alpha,i}}$ al calor total intercambiado de forma tal que $\sum_i Q_{\mathcal{E}_{\alpha,i}} = Q_{\mathcal{E}_\alpha}$, ahora cada modo del entorno contribuye con un $dQ_{\mathcal{E}_{\alpha,\omega}}$ tal que

$$Q_{\mathcal{E}_\alpha} = \int dQ_{\mathcal{E}_{\alpha,\omega}} = \int_0^\infty \frac{dQ_{\mathcal{E}_\alpha}}{d\omega} d\omega. \quad (3.68)$$

Por lo tanto, la Ec. (3.67) en el caso continuo se escribe como

$$\boxed{\Delta S_S(t) + \sum_\alpha \int_0^\infty \frac{1}{k_B\mathcal{T}_\alpha(\omega)} \frac{d}{d\omega} \Delta Q_{\mathcal{E}_\alpha}(t) d\omega + \sum_\alpha \int_0^\infty \frac{d}{d\omega} D_{KL}(\rho_\alpha(0) || \rho_\alpha^{th}) d\omega \geq 0}. \quad (3.69)$$

El paso final es evaluar la Ec. (3.69) en $t = n\tau_d$, dividirla por n y tomar el límite $n \rightarrow \infty$. Veamos qué sucede término a término. Es claro que el último sumando es igual a cero, pues no depende del tiempo:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_\alpha \int_0^\infty \frac{d}{d\omega} D_{KL}(\rho_{\alpha,\omega}(0) || \rho_{\alpha,\omega}^{th}) d\omega = 0. \quad (3.70)$$

El primer sumando de la Ec. (3.69), el correspondiente a ΔS_S , también se anula. En efecto, la entropía de la sustancia motora es una función continua de t y periódica a tiempos largos (pues \mathcal{S} alcanza un estado asintótico que es τ_d periódico), por lo que necesariamente es acotada. Entonces,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta S_S(n\tau_d)}{n} = 0. \quad (3.71)$$

Ahora pasamos al término de interés, que es el correspondiente a la corriente de calor. Para ello intercambiamos el límite con la integral y la derivada, y calculamos

$$\begin{aligned}
\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta Q_{\mathcal{E}_\alpha}(n\tau_d)}{n} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} [Q_{\mathcal{E}_\alpha}(n\tau_d) - Q_{\mathcal{E}_\alpha}(0)] \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} [Q_{\mathcal{E}_\alpha}(n\tau_d) - Q_{\mathcal{E}_\alpha}((n-1)\tau_d) + Q_{\mathcal{E}_\alpha}((n-1)\tau_d) - \dots - Q_{\mathcal{E}_\alpha}(0)] \quad (3.72) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n [Q_{\mathcal{E}_\alpha}(k\tau_d) - Q_{\mathcal{E}_\alpha}((k-1)\tau_d)].
\end{aligned}$$

Como estamos en el caso continuo, existe un k_0 tal que si $k > k_0$, las diferencias $Q_{\mathcal{E}_\alpha}(k\tau_d) - Q_{\mathcal{E}_\alpha}((k-1)\tau_d)$ ya no dependen de k y son iguales al calor promedio $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$ intercambiado durante un ciclo a tiempos largos (que definimos en la Ec. (3.15)). Entonces, dividimos la suma en dos partes:

$$\begin{aligned}
\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta Q_{\mathcal{E}_\alpha}(n\tau_d)}{n} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{k_0} [Q_{\mathcal{E}_\alpha}(k\tau_d) - Q_{\mathcal{E}_\alpha}((k-1)\tau_d)] \\
&\quad + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=k_0}^n [Q_{\mathcal{E}_\alpha}(k\tau_d) - Q_{\mathcal{E}_\alpha}((k-1)\tau_d)] \quad (3.73) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{k_0} [Q_{\mathcal{E}_\alpha}(k\tau_d) - Q_{\mathcal{E}_\alpha}((k-1)\tau_d)] + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} (n - k_0) \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} \\
&= \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha},
\end{aligned}$$

donde el primer sumando del anteúltimo renglón se anula pues la sumatoria es una constante que no depende de n . Juntando los resultados de las Ecs. (3.70), (3.71) y (3.73), llegamos a la desigualdad de Clausius que estamos buscando:

$$\boxed{\sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{1}{T_{\alpha}(\omega)} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}}{d\omega} d\omega \geq 0}. \quad (3.74)$$

3.3.3 Equivalencia entre el enunciado de Kelvin-Planck y la desigualdad de Clausius

La desigualdad de Clausius en la Ec. (3.74) es consecuencia directa de la positividad de la producción de entropía (Ec. (3.64)) y, en general, no es evidente que sea equivalente a la segunda ley de la termodinámica en la forma de Kelvin-Planck. En esta sección vamos a ver que en el caso de reservorios térmicos, estas dos formas de la segunda ley sí son equivalentes.

Primero veamos que la desigualdad de Clausius implica Kelvin-Planck. Asumamos que ésta vale:

$$\sum_{\alpha} \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}}{T_{\alpha}} \geq 0. \quad (3.75)$$

Si todos los reservorios tienen la misma temperatura, entonces la Ec. (3.75) implica $\sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} \geq 0$. Por lo tanto, $\bar{W} \geq 0$ y no podemos extraer trabajo del motor. Este es justamente el enunciado de Kelvin-Planck pues, en el caso térmico, que todos los reservorios tengan la misma

temperatura implica que tenemos un solo reservorio a esa temperatura y cuya densidad espectral es la suma de las densidades individuales. Por lo tanto, demostramos que la desigualdad de Clausius implica Kelvin-Planck. Para probar la implicación en el otro sentido, vamos a mostrar que la violación de Clausius implica la violación de Kelvin-Planck (y, por lo tanto, Kelvin-Planck implica Clausius). Supongamos que no vale Clausius:

$$\sum_{\alpha} \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}}{T_{\alpha}} < 0. \quad (3.76)$$

Si la Ec. (3.76) es cierta, en el caso particular en que todos los reservorios tienen la misma temperatura se sigue que $\sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}} < 0$ y, como consecuencia, $\bar{W} < 0$. Es decir, el motor está produciendo trabajo utilizando un solo reservorio térmico. Ésta es una clara violación del enunciado de Kelvin-Planck. Entonces, demostramos que si no vale la desigualdad de Clausius, tampoco vale Kelvin-Planck.

3.4 Cota generalizada para la eficiencia de los motores lineales

En esta sección vamos a dar una cota generalizada para la eficiencia del motor, que definimos en la **Sección 3.2.4**, y recordamos está dada por la ecuación

$$\eta = \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S} - \bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow S}}{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S}}, \quad (3.77)$$

donde $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S} = \sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{+}$ es el calor neto que fluye de la sustancia motora a los reservorios, y $\bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow S} = \sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{-}$ es el calor neto que fluye de los reservorios a la sustancia motora. Es decir, $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S}$ es la energía que el motor utiliza para funcionar y $\bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow S}$ es el calor residual que expulsa la sustancia motora.

Para acotar la eficiencia vamos a utilizar la desigualdad de Clausius demostrada en la sección anterior, mostrada en la Ec. (3.74). Entonces, tomamos a la Ec. 3.74 y dividimos a $d\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}/d\omega$ en su parte positiva y su parte negativa como las definimos previamente en la Ec. (3.31):

$$\sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{1}{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{+}}{d\omega} d\omega - \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{1}{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{-}}{d\omega} d\omega \geq 0. \quad (3.78)$$

Debido a que cada uno de los integrandos en la Ec. (3.78) son positivos, podemos acotar las integrales de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{1}{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{+}}{d\omega} d\omega &\leq \frac{1}{\min\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}} \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{+}}{d\omega} d\omega \\ &= \frac{1}{\min\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}} \sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{+} \\ &= \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S}}{\min\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}} \end{aligned} \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{1}{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}\alpha}^{-}}{d\omega} d\omega &\geq \frac{1}{\text{máx}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}} \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}\alpha}^{-}}{d\omega} d\omega \\
&= \frac{1}{\text{máx}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}} \sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}\alpha}^{-} \\
&= \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{S}}}{\text{máx}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}}
\end{aligned} \tag{3.80}$$

Combinando las desigualdades en las Ecs. (3.79) y (3.80) con la desigualdad en la Ec. (3.78) llegamos a

$$\frac{\bar{Q}_{\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{S}}}{\text{mín}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}} - \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{S}}}{\text{máx}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}} \geq 0. \tag{3.81}$$

La Ec. (3.81) implica dos cosas. Primero, si la escribimos como

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{S}} \geq \frac{\text{mín}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}}{\text{máx}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}} \bar{Q}_{\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{S}}, \tag{3.82}$$

podemos ver que la energía que se pierde sin ser convertida a trabajo útil, $\bar{Q}_{\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{S}}$, no puede ser arbitrariamente chica. Ésto, como vimos en la **Sección 3.3.2.2**, es consecuencia de la producción irreversible de entropía. Y segundo, que la eficiencia está acotada. Efectivamente, si escribimos la Ec. (3.77) como

$$\eta = 1 - \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{S}}}{\bar{Q}_{\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{S}}} \tag{3.83}$$

y utilizamos la Ec. (3.81), llegamos a

$$\boxed{\eta \leq 1 - \frac{\text{mín}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}}{\text{máx}\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}}}, \tag{3.84}$$

que es una cota generalizada para la eficiencia al estilo de la cota de Carnot, es decir, que solo depende de características iniciales de los reservorios y no de su estructura, de la sustancia motora, o del ciclo termodinámico que se esté realizando. Esta cota coincide con los dos casos estudiados en la literatura:

- **Reservorios térmicos a temperaturas T_{α} .** Recordamos que, en este caso, el número de ocupación es $n_{\alpha}^0(\omega) = [\exp(\hbar\omega/k_B T_{\alpha}) - 1]^{-1}$ lo que implica que, según la Ec. (3.50), las temperaturas locales son iguales a las termodinámicas: $\mathcal{T}_{\alpha}(\omega) = T_{\alpha}$. Por lo tanto, la cota para la eficiencia es

$$\boxed{\eta \leq 1 - \frac{\text{mín}\{T_{\alpha}\}}{\text{máx}\{T_{\alpha}\}}}, \tag{3.85}$$

que no es otra cosa más que la eficiencia de Carnot. El hecho de que ésta sea recuperada cuando el estado inicial de los reservorios es un producto de estados térmicos es un resultado general que vas más allá de los límites de este modelo y puede ser obtenido, por ejemplo, utilizando teoremas de fluctuación [54, 55].

- **Dos reservorios, uno de ellos térmico a temperatura T_c , y otro térmico y *squeezado* a temperatura $T_h > T_c$ y parámetro de *squeezing* r** (ver, por ejemplo, la Ref. [20]). La temperatura local del reservorio térmico es igual a T_c , y la temperatura local del reservorio *squeezado*, en el límite de alta temperatura, es $\mathcal{T}_h = \cosh(2r) T_h$ (en este

caso, la ecuación que define \mathcal{T}_h es $\coth(\hbar\omega/2k_B\mathcal{T}_h(\omega)) = \cosh(2r)\coth(\hbar\omega/2k_B T_h)$. Entonces, la cota es

$$\eta \leq 1 - \frac{T_c}{\cosh(2r) T_h}, \quad (3.86)$$

que, para cualquier $r > 0$, es mayor a la eficiencia de Carnot. De hecho, como $\mathcal{T}_h(\omega) \geq \cosh(2r) T_h \geq T_h$, aunque no estemos en el límite de altas temperaturas, la cota

$$\eta \leq 1 - \frac{T_c}{\text{máx}\{\mathcal{T}_\alpha(\omega)\}} \quad (3.87)$$

es siempre mayor a la de Carnot. Es decir, *squeezeando* al reservorio caliente podemos alcanzar mayores eficiencias que la de Carnot sin necesidad de modificar las temperaturas termodinámicas de los reservorios..

La Ec. (3.84) no es solamente una cota para la eficiencia de motores cuánticos lineales, sino que es una generalización de la segunda ley de la termodinámica para este tipo de máquinas de la forma enunciada originalmente por Carnot: *el poder motor del calor es independiente de la sustancia motora utilizada, y su valor está fijado solamente por las temperaturas de los cuerpos que efectúan la transferencia de calor* (traducido del inglés: *The motive power of heat is independent of the agents employed to realize it; its quantity is fixed solely by the temperatures of the bodies between which is effected, finally, the transfer of caloric*). La cota generalizada para la eficiencia es equivalente a la desigualdad de Clausius solo en el caso en que el motor funcione entre dos reservorios térmicos.

3.5 Costo de preparar reservorios no térmicos

Como mostramos en la sección anterior, los motores cuánticos lineales que usan reservorios térmicos como fuente de energía siempre satisfacen la cota de Carnot, ya que su eficiencia η es menor o igual que $\eta_c = 1 - \text{mín}\{T_\alpha\}/\text{máx}\{T_\alpha\}$. Considerando que esta cota es válida independientemente de cómo evolucione el motor, uno podría argumentar que debería seguir siendo válida en un escenario en el que:

- I Se preparan reservorios en un estado inicial térmico.
- II Estos reservorios térmicos son sometidos a algún potencial externo que mantenga la forma funcional cuadrática del Hamiltoniano y los transforme en reservorios no térmicos.
- III Estos reservorios, ahora no térmicos, son acoplados a la sustancia motora y son utilizados para hacer funcionar el motor.

Si calculamos la eficiencia solo en el paso III del proceso anterior, observaríamos una violación aparente de la cota de Carnot, ya que tendríamos

$$\eta \leq \eta_g = 1 - \frac{\text{mín}\{\mathcal{T}_\alpha(\omega)\}}{\text{máx}\{\mathcal{T}_\alpha(\omega)\}} \quad (3.88)$$

(de ahora en más vamos a suponer que estamos en el caso en que $\eta_g \geq \eta_c$). Claramente, la diferencia entre η_c y η_g proviene de la energía invertida en el paso II, que es necesaria

para preparar los reservorios no térmicos a partir de unos térmicos. Utilizando nuestros resultados previos, podemos obtener este costo energético \mathfrak{C} relativo a la energía promedio requerida para hacer funcionar el motor durante un ciclo (es decir, relativo a $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}$) de la siguiente manera. Primero consideremos la definición de la eficiencia si fuese computada en el paso III del proceso descrito anteriormente:

$$\eta = \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}} - \bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{S}}}{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}}. \quad (3.89)$$

Ahora incluyamos en η la energía invertida \mathfrak{C} en el paso II para transformar los reservorios térmicos en no térmicos. Como este costo no modifica el trabajo producido por el motor, debería ser incluido solo en el denominador de η , que representa el total de la energía invertida. Vamos a llamar a esta nueva eficiencia $\tilde{\eta}$:

$$\begin{aligned} \tilde{\eta} &= \frac{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}} - \bar{Q}_{\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{S}}}{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}} + \mathfrak{C}} \\ &= \frac{1}{1 + \mathfrak{C}/\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}} \eta \end{aligned} \quad (3.90)$$

Según la Ec. (3.84), $\eta \leq \eta_g$, por lo que

$$\tilde{\eta} \leq \frac{1}{1 + \mathfrak{C}/\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}} \eta_g. \quad (3.91)$$

Pero, como al incluir el costo de transformar los reservorios térmicos en unos no térmicos estamos considerando el proceso entero, la cota de la Ec. (3.91) debería ser similar a la eficiencia de Carnot:

$$\frac{1}{1 + \mathfrak{C}/\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}} \eta_g \simeq \eta_c. \quad (3.92)$$

Por lo tanto, podemos concluir que

$$\boxed{\frac{\mathfrak{C}}{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}} \simeq \frac{\eta_g - \eta_c}{\eta_c}}. \quad (3.93)$$

Es decir, el costo energético de transformar los reservorios térmicos en no térmicos relativo a la energía necesaria para hacer funcionar el motor durante un ciclo es similar a la diferencia relativa entre la eficiencia generalizada y la eficiencia de Carnot.

La Ec. (3.93) tiene dos consecuencias importantes. Primero, nos permite saber *a priori* el mínimo costo energético que debemos pagar si queremos producir una cierta cantidad de trabajo a una eficiencia específica, dada una cantidad inicial de recursos térmicos. En efecto, como $|\bar{W}|/\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}} \leq \eta_g$, utilizando la Ec. (3.93) obtenemos

$$\boxed{\mathfrak{C} \geq \frac{\eta_g - \eta_c}{\eta_g \eta_c} |\bar{W}|}. \quad (3.94)$$

La Ec. (3.94) nos dice el costo energético de preparar reservorios térmicos que produzcan una cantidad de trabajo por ciclo \bar{W} a una eficiencia η_g , partiendo de reservorios térmicos con temperaturas máxima y mínima $\max\{T_\alpha\}$ y $\min\{T_\alpha\}$, respectivamente, es al menos

$(\eta_g - \eta_c)|\bar{W}|/\eta_g\eta_c$. De hecho, si $\eta_g > \max\{T_\alpha\}/\min\{T_\alpha\} - 1$, entonces dicho costo es mayor al trabajo producido durante un ciclo.

La segunda consecuencia importante de la Ec. (3.93) es que el costo energético de mejorar la eficiencia mediante el uso de recursos no térmicos en relación a la energía necesaria para hacer funcionar el motor durante un ciclo tiene un máximo valor posible determinado solo por la temperatura del reservorio más frío y la del más caliente. Efectivamente, debido a que $\eta_g \leq 1$, entonces

$$\frac{\mathfrak{C}}{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}} \leq \frac{\min\{T_\alpha\}}{\max\{T_\alpha\} - \min\{T_\alpha\}}. \quad (3.95)$$

Esto significa que, a medida que η_g se acerca a uno, el costo \mathfrak{C} crece a la misma velocidad que $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}$. Por lo tanto, mejorar la eficiencia usando recursos no térmicos no es mucho más caro que hacer funcionar el motor durante un ciclo. De hecho, si inicialmente comenzamos con reservorios térmicos tales que $\max\{T_\alpha\} > 2\min\{T_\alpha\}$, debido a que esto implica que \mathfrak{C} es menor que $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}$, entramos en un régimen de bajo costo en el cual mejorar la eficiencia es más barato que hacer funcionar el motor durante un ciclo. En la Fig. 3.4 mostramos un diagrama de fases con los diferentes regímenes de costo energético en los que puede operar el motor.

Como ejemplo consideremos el caso mencionado en la sección anterior, en el que tenemos un reservorio térmico a temperatura T_c , y otro térmico y *squeezeado* a temperatura $T_h > T_c$ y parámetro de *squeezing* r . El costo de haber *squeezeado* el reservorio caliente es

$$\frac{\mathfrak{C}}{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}} \simeq \frac{T_c}{T_h - T_c} \left[1 - \frac{1}{\cosh(2r)} \right]. \quad (3.96)$$

Para que dicho costo sea menor que la energía necesaria para hacer funcionar el motor durante un ciclo, el parámetro de *squeezing* debe ser tal que $2 - T_h/T_c < 1/\cosh(2r)$. Entonces, si $T_h < 2T_c$, lo que equivale a tener recursos térmicos iniciales tales que $\eta_c < 1/2$, solo pequeños valores de r cumplen la desigualdad y, por ende, no se pueden alcanzar altas eficiencias en el régimen de bajo costo. Por el contrario, si $T_h > 2T_c$ o, equivalentemente, $\eta_c > 1/2$, entonces η_g puede estar arbitrariamente cerca de uno y \mathfrak{C} va a seguir siendo menor que $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}$. Finalmente, es interesante notar que en el caso de *squeezings* grandes, \mathfrak{C} y $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}$ crecen de forma similar, mientras que para pequeños valores de r , \mathfrak{C} crece como r^2 mientras que $\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}$ se mantiene aproximadamente constante. Por ejemplo, para $r = 3$, tenemos $1 - 1/\cosh(2r) \simeq 0,995$, que está muy cerca de su valor límite, y, por lo tanto, podemos aproximar

$$\frac{\mathfrak{C}}{\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}} \simeq \frac{T_c}{T_h - T_c} \quad (3.97)$$

para cualquier $r \gtrsim 3$. Por el otro lado, para $r \lesssim 1/3$ tenemos $1 - 1/\cosh(2r) \simeq 2r^2$ y, por lo tanto,

$$\mathfrak{C} \simeq 2r^2 \frac{T_c}{T_h - T_c} \bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}|_{r=0}. \quad (3.98)$$

3.6 ¿Y dónde está lo cuántico?

Al analizar el calor intercambiado entre la sustancia motora y los reservorios en la **Sección 3.2.3** observamos que habían dos procesos encargados de realizarlo: los resonantes y

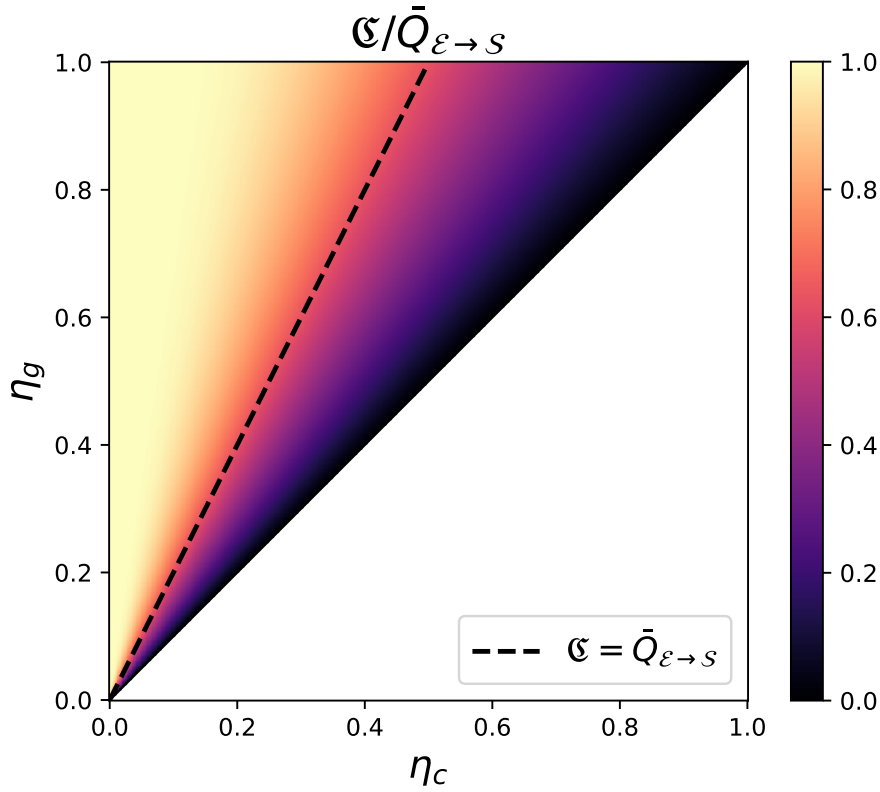


Figura 3.4: Gráfico normalizado de $\mathcal{C}/\bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S}$ en función de η_c y la eficiencia objetivo η_g . Todos los puntos entre medio de la cota inferior ($\eta_g = \eta_c$) y la línea punteada ($\eta_g = 2\eta_c$) pertenecen al régimen de bajo costo, en el que mejorar la eficiencia es más barato que hacer funcionar el motor durante un ciclo ($\mathcal{C} < \bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S}$), mientras que cualquier mejora que se encuentre por arriba de la línea punteada requiere más energía para implementar (pues $\mathcal{C} > \bar{Q}_{\mathcal{E} \rightarrow S}$).

los no resonantes. En analogía al flujo de calor clásico que va desde un reservorio más caliente a otro más frío, los procesos resonantes transportan excitaciones entre un modo de un reservorio más poblado a uno menos poblado. Por otro lado, los procesos no resonantes inyectan energía en los reservorios al dividir un paquete de energía del potencial externo en dos y depositarlos en dos modos de los reservorios, creando así nuevas excitaciones. Este proceso es puramente cuántico y no tiene un análogo clásico. Además, en el **Capítulo 4** vamos a ver que dentro y entre los reservorios constantemente se generan correlaciones no solo clásicas, sino también cuánticas e incluso entrelazamiento. Entonces, al ver la desigualdad de Clausius que obtuvimos antes,

$$\sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{1}{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)} \frac{d\bar{Q}_{\mathcal{E}\alpha}}{d\omega} d\omega \geq 0, \quad (3.99)$$

o la cota generalizada para la eficiencia,

$$\eta \leq 1 - \frac{\min\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}}{\max\{\mathcal{T}_{\alpha}(\omega)\}}, \quad (3.100)$$

y notar que son completamente análogas a los resultados clásicos, una pregunta que surge inmediatamente es ¿dónde se manifiestan los efectos cuánticos nombrados anteriormente? O, más aún, ¿qué es exactamente lo cuántico de este motor? Uno podría argumentar que, por ejemplo, las temperaturas locales que aparecen en las Ecs. (3.99) y (3.100), $\mathcal{T}_\alpha(\omega)$, no son las temperaturas termodinámicas usuales a las que estamos acostumbrados de la teoría clásica y eso es un reflejo de lo cuántico del motor. La realidad es que eso no es del todo cierto. Si bien las temperaturas sí son diferentes, eso es a causa de haber usado algún tipo de reservorio que, en principio, podría no estar disponible clásicamente, y no por la presencia de efectos cuánticos reales como el entrelazamiento o la coherencia.

La respuesta a la pregunta es que sin duda los efectos cuánticos cumplen un papel importante en el funcionamiento del motor *instante a instante*, pero fueron mitigados al estudiar el promedio temporal. Lo anterior no quiere decir que no los observamos por una falencia del cálculo, sino que en promedio temporal a tiempos largos no son ni beneficiosos ni perjudiciales para el motor. Para ver ésto, consideremos la producción instantánea de entropía durante un ciclo del motor. Es decir, entre algún tiempo arbitrario t_0 y $t_0 + \tau_d$ (a diferencia de como hicimos antes que la calculamos entre 0 y t , y luego tomamos el promedio temporal):

$$\Delta S_S + \sum_{\alpha,i} \frac{\Delta Q_{\mathcal{E}_{\alpha,i}}}{k_B \mathcal{T}_\alpha(\omega_i)} - \sum_{\alpha,i} \Delta D_{KL}(\rho_{\alpha,i} \| \rho_{\alpha,i}^{th}) + \mathcal{I}(\mathcal{S}, \mathcal{E}) + \mathcal{C}(\mathcal{E}) \geq 0. \quad (3.101)$$

Notamos que aparecen tres nuevos términos comparado a lo que obtuvimos antes en la Ec. (3.67). Por un lado aparecen dos cantidades que miden las correlaciones totales, tanto clásicas como cuánticas, presentes entre las respectivas partes: $\mathcal{I}(\mathcal{S}, \mathcal{E}) = S_S(t_0) + S_{\mathcal{E}}(t_0) - S_{S\mathcal{E}}(t_0)$, que es la información mutua entre la sustancia motora y todos los reservorios al comienzo del ciclo, y $\mathcal{C}(\mathcal{E}) = \sum_{\alpha,i} S_{\mathcal{E}_{\alpha,i}}(t_0) - S_{\mathcal{E}}(t_0)$, que es la correlación total presente entre los reservorios (\mathcal{C} es una de las posibles generalizaciones de la información mutua a múltiples variables [56]). Por el otro, aparece $\Delta D_{KL}(\rho_{\alpha,i} \| \rho_{\alpha,i}^{th}) = D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(t_0 + \tau_d) \| \rho_{\alpha,i}^{th}) - D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(t_0) \| \rho_{\alpha,i}^{th})$, donde la divergencia de Kullback-Leibler $D_{KL}(\rho_{\alpha,i}(t) \| \rho_{\alpha,i}^{th})$ es una medida de la distinguibilidad entre el estado reducido del oscilador i -ésimo del reservorio \mathcal{E}_α a algún tiempo t , $\rho_{\alpha,i}(t)$, y el estado de equilibrio térmico $\rho_{\alpha,i}^{th}$ respecto de la temperatura local $\mathcal{T}_\alpha(\omega_i)$. Por lo tanto, $\Delta D_{KL}(\rho_{\alpha,i} \| \rho_{\alpha,i}^{th})$ mide la desviación total del estado reducido $\rho_{\alpha,i}$ respecto del estado de equilibrio térmico $\rho_{\alpha,i}^{th}$ durante el ciclo completo. Es decir, si al final del ciclo el estado reducido del oscilador i -ésimo se encuentra *más cerca* del estado de equilibrio térmico correspondiente (es decir, si tiende a *termalizar*), entonces $\Delta D_{KL}(\rho_{\alpha,i} \| \rho_{\alpha,i}^{th})$ es negativo. Si, en cambio, su estado se *aleja* del estado de equilibrio térmico, entonces $\Delta D_{KL}(\rho_{\alpha,i} \| \rho_{\alpha,i}^{th})$ es positivo. En general, el acoplamiento entre la sustancia motora y los reservorios de un motor produce que éstos se desvían respecto del estado de equilibrio térmico, por lo que uno esperaría que $\Delta D_{KL}(\rho_{\alpha,i} \| \rho_{\alpha,i}^{th})$ sea positivo la mayor parte del tiempo.

Ahora podemos pasar al límite continuo y suponer que t_0 es lo suficientemente grande como para que \mathcal{S} haya alcanzado su estado estacionario de equilibrio. De esta forma obtenemos una nueva desigualdad de Clausius, que depende del tiempo e incluye efectos cuánticos reales:

$$\sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{1}{k_B \mathcal{T}_\alpha(\omega)} \frac{d}{d\omega} \Delta Q_{\mathcal{E}_\alpha} d\omega \geq \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{d}{d\omega} \Delta D_{KL}(\rho_{\alpha} \| \rho_{\alpha}^{th}) d\omega - \mathcal{I}(\mathcal{S}, \mathcal{E}) - \mathcal{C}(\mathcal{E}). \quad (3.102)$$

Utilizando esta desigualdad podemos acotar la eficiencia instantánea del motor durante un ciclo (es decir, el trabajo producido entre t_0 y $t_0 + \tau_d$ dividido el calor que ingresa en la

sustancia motora durante ese mismo período):

$$\eta(t_0) \leq 1 - \frac{\min\{\mathcal{T}_\alpha(\omega)\}}{\max\{\mathcal{T}_\alpha(\omega)\}} + \frac{k_B \min\{\mathcal{T}_\alpha(\omega)\}}{\Delta Q_{\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{S}}} \left[\mathcal{I}(\mathcal{S}, \mathcal{E}) + \mathcal{C}(\mathcal{E}) - \sum_\alpha \int_0^\infty \frac{d}{d\omega} \Delta D_{KL}(\rho_\alpha \| \rho_\alpha^{th}) d\omega \right]. \quad (3.103)$$

Notamos que tanto en la nueva desigualdad de Clausius en la Ec. (3.102), como en la nueva cota de la eficiencia en la Ec. (3.103), obtenemos tres nuevos términos que se suman a los de las Ecs. (3.99) y (3.100). Si bien $\mathcal{I}(\mathcal{S}, \mathcal{E})$ y $\mathcal{C}(\mathcal{E})$ son cantidades positivas, y uno esperaría que la integral de $\Delta D_{KL}(\rho_\alpha \| \rho_\alpha^{th})$ también lo sea, en general no es claro que haya una relación directa entre ellos para afirmar que el conjunto tenga un signo definido en todo momento. Por lo tanto, no es cierto que los efectos cuánticos contribuyan de forma netamente positiva o netamente negativa en el funcionamiento del motor. En algunos ciclos contribuirán de forma positiva, y en otros de forma negativa. De hecho, para que en el límite a tiempos largos estas ecuaciones coincidan con los resultados obtenidos previamente en las Ecs. (3.99) y (3.100), el efecto neto tiene que ser neutro.

Existe un caso en el que sí podemos afirmar algo sobre los nuevos términos en las Ecs. (3.102) y (3.103), y es cuando los reservorios son estáticos. Es decir, en la aproximación en la que consideramos que no evolucionan en el tiempo. Si esto sucede, y debido a que cada uno de ellos comenzó en un estado completamente descorrelacionado del resto, entonces $\mathcal{I}(\mathcal{S}, \mathcal{E})$, $\mathcal{C}(\mathcal{E})$ y $\Delta D_{KL}(\rho_\alpha \| \rho_\alpha^{th})$ se anulan y obtenemos:

$$\sum_\alpha \int_0^\infty \frac{1}{\mathcal{T}_\alpha(\omega)} \frac{d}{d\omega} \Delta Q_{\mathcal{E}_\alpha} d\omega \geq 0, \quad (3.104)$$

y

$$\eta(t_0) \leq 1 - \frac{\min\{\mathcal{T}_\alpha(\omega)\}}{\max\{\mathcal{T}_\alpha(\omega)\}}. \quad (3.105)$$

Por lo tanto, al suprimir la evolución temporal de los reservorios eliminamos todo el rastro de posibles efectos cuánticos que modifiquen el funcionamiento del motor. En otras palabras, obtenemos un motor *clásico*. Cabe resaltar que, si bien las Ecs. (3.104) y (3.105) se parecen a las Ecs. (3.99) y (3.100) que obtuvimos en nuestro análisis en secciones anteriores, reflejan dos cosas completamente distintas. Las Ecs. (3.104) y (3.105) nos dicen que no hay efectos cuánticos presentes en ese motor en particular o, mejor dicho, que afecten su funcionamiento, mientras que las Ecs. (3.99) y (3.100) implican que en promedio los efectos cuánticos no modifican el funcionamiento de *ningún* motor.

En conclusión, sin duda los efectos cuánticos en general influyen en el funcionamiento de los motores cuánticos lineales instante a instante, y probablemente sea posible aprovecharlos extrayendo trabajo en tiempos en los que éstos actúen de forma beneficiosa, pero si uno extrae trabajo constantemente del motor, en promedio, no va a notar efecto alguno.

Capítulo 4

Generación de correlaciones clásicas y cuánticas en los reservorios

En este capítulo vamos a estudiar más en profundidad a los reservorios, que es una parte de los motores cuánticos, y de las máquinas térmicas en general, que suele quedar rezagada y comunmente se asume que, debido a su gran tamaño comparado a la sustancia motora, su evolución es trivial y poco interesante. En particular, vamos a analizar el tipo de correlaciones que son producidas a tiempos largos por el transporte de excitaciones debido a los procesos resonantes, y por la creación de pares de excitaciones a cargo de los procesos no resonantes que, como veremos más adelante, son los únicos dos procesos que generan correlaciones más allá del régimen transitorio. Vamos a mostrar que, lejos de ser poco interesante, los modos de los reservorios están correlacionados clásica y cuanticamente, y algunos de ellos están incluso entrelazados.

Para no complicar innecesariamente las cuentas y las expresiones finales, vamos a considerar una simplificación del modelo que venimos usando y explicamos en detalle en el **Capítulo 2**: la sustancia motora va a estar compuesta por un solo oscilador (lo que nos va permitir trabajar con escalares en vez de matrices), y solo vamos a considerar dos reservorios térmicos que vamos a llamar \mathcal{E}_L y \mathcal{E}_R (por *left* y *right*), a temperaturas T_L y T_R , respectivamente. Vamos a escribir los Hamiltonianos de las distintas partes como:

$$H_S(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}V(t)x^2 \quad (4.1)$$

$$H_{\mathcal{E}} = \sum_{\alpha=L,R} p_{\alpha}^T m_{\alpha}^{-1} p_{\alpha} / 2 + q_{\alpha}^T m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha} / 2 \quad (4.2)$$

$$H_{S\mathcal{E}} = \sum_{\alpha=L,R} x \sum_i c_{\alpha,i} q_{\alpha,i} \quad (4.3)$$

Notar que cambiamos las matrices de acoplamiento C_{α} por los escalares $c_{\alpha,i}$. Antes de seguir queremos hacer énfasis que si bien es un modelo simplificado, un motor formado por estos componentes es perfectamente capaz de entregar trabajo. La generalización a una sustancia motora formada por una red de osciladores es directa, solo que las expresiones se vuelven más engorrosas.

A continuación explicaremos en detalle entre qué partes de los reservorios estudiaremos correlaciones. Luego, vamos a dar una pequeña introducción sobre las medidas que utilizaremos para cuantificar dichas correlaciones, pero sin demostraciones. Mostraremos cómo

es el estado de las partes relevantes de los reservorios en el límite de tiempos largos y veremos que solamente los procesos resonantes y no resonantes son los que permanentemente las correlacionan en ese régimen. Finalmente, estudiaremos las medidas presentadas anteriormente en el límite de acoplamiento débil (es decir, a menor orden en la constante de acoplamiento γ_0) y discutiremos los resultados.

Este capítulo está basado en los trabajos *Entanglement generation in quantum thermal machines* [42] y *Time-extensive classical and quantum correlations in thermal machines* [43].

4.1 Granulado de los reservorios

Debido a que estamos considerando reservorios continuos, no tiene sentido estudiar correlaciones entre modos individuales de éstos, por lo que vamos a estudiarlas entre dos *bandas* de frecuencias. Para ello, vamos a realizar un granulado (o *coarse graining*) del espectro de los reservorios de la siguiente forma. Por cada \mathcal{E}_α consideramos un conjunto numerable de frecuencias $\{\omega_i\}$ bajo las siguientes dos condiciones:

- I Por cada ω_i en \mathcal{E}_α , existe ω_j dentro del conjunto de frecuencias correspondiente a \mathcal{E}_β (β puede ser igual o no a α) tal que $\omega_j = \omega_i + k\omega_d > 0$ para todo k entero.
- II Por cada ω_i en \mathcal{E}_α , existe ω_j dentro del conjunto de frecuencias correspondiente a \mathcal{E}_β (β puede ser igual o no a α) tal que $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$ para todo k entero positivo.

La condición I es para incluir todas las correlaciones generadas por los procesos resonantes, mientras que la condición II incluye a las generadas por los no resonantes. Luego de definir el conjunto $\{\omega_i\}$, tomamos un ancho $\Delta\omega$ uniforme e igual para ambos reservorios y definimos una *banda* como el intervalo de ancho $\Delta\omega$ centrado en cada ω_i . Es decir, una banda es el intervalo $[\omega_i - \Delta\omega/2, \omega_i + \Delta\omega/2]$. El único cuidado que hay que tener es que $\Delta\omega$ debe ser tal que bandas centradas en distintas frecuencias de un mismo entorno no se superpongan: $[\omega_i - \Delta\omega/2, \omega_i + \Delta\omega/2] \cap [\omega_j - \Delta\omega/2, \omega_j + \Delta\omega/2] = \emptyset$ si $i \neq j$ y $\omega_i, \omega_j \in \mathcal{E}_\alpha$.

Con las definiciones anteriores podemos ser más precisos y decir que vamos a estudiar las correlaciones generadas entre una banda centrada en la frecuencia $\omega_i \in \mathcal{E}_R$ y otra banda centrada en $\omega_j \in \mathcal{E}_L$ en dos casos: cuando están correlacionadas por el transporte de excitaciones, es decir, cuando se cumple $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$, y cuando están correlacionadas por la creación de pares de excitaciones, que es el caso $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$. Estas bandas están representadas esquemáticamente en la Fig. 4.1. Todas las expresiones que vamos a obtener van a depender del producto $\Delta\omega I(\omega)$ que, para $\Delta\omega$ suficientemente pequeño, juega el rol de una constante de acoplamiento efectiva entre la banda y el oscilador de \mathcal{S} , pues $\Delta\omega I_\alpha(\omega_i) \simeq c_{\alpha,i}^2 / m_i \omega_i$.

Antes de pasar a analizar las correlaciones tenemos que hablar sobre los estados iniciales de las bandas. Como dijimos al comienzo, vamos a restringirnos a reservorios térmicos, por lo que el estado reducido inicial de cada uno de ellos es

$$\rho_\alpha(t=0) = \frac{1}{Z_\alpha} e^{-H_{\mathcal{E}_\alpha} / k_B T_\alpha}, \quad (4.4)$$

que es un caso particular de estado Gaussiano. Recordamos que $H_{\mathcal{E}_\alpha}$ es un Hamiltoniano no interactuante, por lo que cada oscilador de los reservorios (antes de pasar al límite continuo)

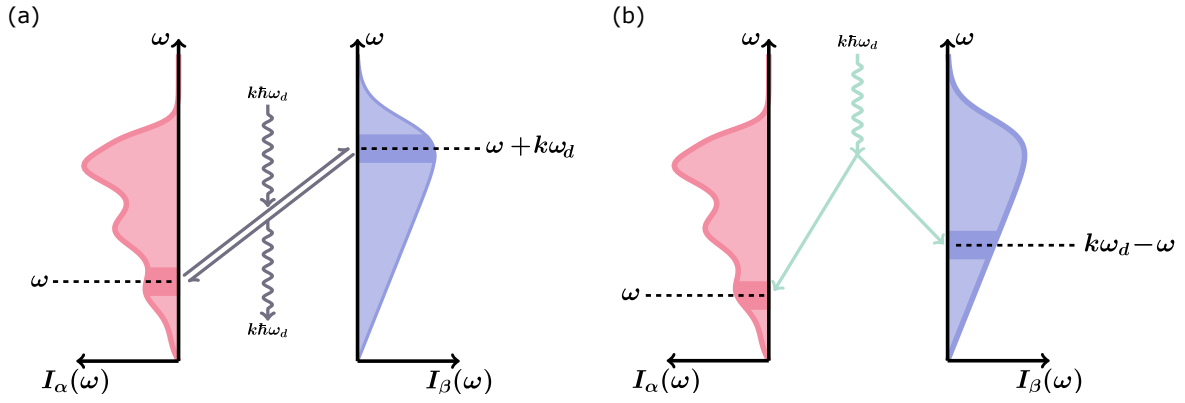


Figura 4.1: Bandas en los entornos (regiones más oscuras de cada esquema). (a) Bandas correlacionadas mediante transporte de excitaciones (procesos resonantes). (b) Bandas correlacionadas mediante creación de pares de excitación (procesos no resonantes).

comienza también en un estado Gaussiano. Esto se traduce en que, al pasar al continuo y realizar el granulado del espectro del reservorio, el estado inicial de cada una de las bandas es también Gaussiano. Y como el estado inicial es Gaussiano, y la evolución está dada por un Hamiltoniano cuadrático, su estado a todo tiempo también lo es. Entonces, está completamente caracterizado por su matriz de covariancia. Por lo tanto, no es sorprendente que, como vamos a mostrar luego, podamos estudiar las correlaciones entre bandas analizando solo sus matrices de covariancia. El detalle importante a tener en cuenta es que *la matriz de covariancia de la banda centrada en $\omega_i \in \mathcal{E}_\alpha$ y de ancho $\Delta\omega$ coincide con la matriz de covariancia del oscilador de frecuencia ω_i del reservorio discreto pero haciendo la identificación $c_{\alpha,i}^2/m_i\omega_i \rightarrow \Delta\omega I_\alpha(\omega_i)$* . Es decir, la matriz de covariancia de la banda centrada en $\omega_i \in \mathcal{E}_\alpha$ está dada por

$$\sigma_i(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \text{tr}[\rho(0)\{q_{\alpha,i}(t), q_{\alpha,i}(t)\}] & \text{tr}[\rho(0)\{q_{\alpha,i}(t), p_{\alpha,i}(t)\}] \\ \text{tr}[\rho(0)\{q_{\alpha,i}(t), p_{\alpha,i}(t)\}] & \text{tr}[\rho(0)\{p_{\alpha,i}(t), p_{\alpha,i}(t)\}] \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

reemplazando $c_{\alpha,i}^2/m_i\omega_i$ por $\Delta\omega I_\alpha(\omega_i)$ (y adimensionalizando las coordenadas).

4.2 Elementos de información cuántica para estados Gaussianos

En esta sección vamos a presentar las herramientas necesarias para estudiar la causa y naturaleza de las correlaciones formadas entre bandas de los reservorios. Para ello nos vamos a basar en las Refs. [57, 58, 59]. No vamos a realizar demostraciones pues no es el objetivo de la tesis, y la literatura sobre información cuántica para estados Gaussianos es extensa.

Para cuantificar las correlaciones entre bandas de los reservorios, producidas por el transporte de excitaciones o la creación de pares de excitaciones, vamos a utilizar tres medidas estándares en información cuántica:

¹ La *información mutua* para las correlaciones totales (clásicas y cuánticas).

II La *discordia cuántica* para las correlaciones cuánticas.

III La *negatividad logarítmica* para el entrelazamiento.

A continuación vamos a explicar cada una de ellas y mostrar cómo calcularlas. Para ello, como veremos en breve, necesitaremos la matriz de covariancia conjunta de ambas bandas, también llamada matriz de covariancia de dos modos, pues el estado es llamado *estado Gaussiano de dos modos*. Ésta, análogamente a como vimos en la **Sección 2.5**, aparece en la densidad de cuasiprobabilidad de Wigner del estado global al marginalizar sobre todas las coordenadas excepto las de las dos bandas. La notación estándar en la literatura para dicha matriz es

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha} & \boldsymbol{\gamma} \\ \boldsymbol{\gamma}^T & \boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

donde, para una banda centrada en $\omega_i \in \mathcal{E}_\alpha$ y otra centrada en $\omega_j \in \mathcal{E}_\beta$, cada una de las submatrices de $\boldsymbol{\sigma}$ que aparecen en la Ec. (4.6) son:

$$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\sigma}_i \quad (4.7)$$

$$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\sigma}_j \quad (4.8)$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \text{tr}[\rho(0)\{q_{\alpha,i}, q_{\beta,j}\}] & \text{tr}[\rho(0)\{q_{\alpha,i}, p_{\beta,j}\}] \\ \text{tr}[\rho(0)\{q_{\alpha,i}, p_{\beta,j}\}] & \text{tr}[\rho(0)\{p_{\alpha,i}, p_{\beta,j}\}] \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Es decir, las submatrices en la diagonal de $\boldsymbol{\sigma}$ son las matrices de covariancia individuales de las bandas, dadas por la Ec. (4.5), y las matrices extradiagonales, $\boldsymbol{\gamma}$ y su traspuesta, almacenan información sobre las correlaciones entre ellas. Notar que todas las medidas que vamos a presentar abajo se anulan si $\det \boldsymbol{\gamma} = 0$, indicando la ausencia de cualquier tipo de correlación.

4.2.1 Información mutua

La información mutua clásica entre dos variables aleatorias es una medida de la dependencia mutua entre ellas. Cuantifica las correlaciones entre ambas partes midiendo la cantidad de información que se puede obtener sobre una de ellas al observar la otra. Dada una distribución de probabilidad conjunta $p(x, y)$, la información mutua entre las variables X e Y se define como

$$\mathcal{I}(X : Y) \doteq H(X) + H(Y) - H(X, Y), \quad (4.10)$$

donde H es la entropía de Shannon: $H(X) = -\sum_i x_i \ln p(x_i)$. Si X e Y son variables independientes, es decir, descorrelacionadas, entonces la distribución de probabilidad conjunta es simplemente el producto de las distribuciones $p(x, y) = p(x)p(y)$ y la información mutua se anula: $\mathcal{I}(X : Y) = 0$. Por otro lado, si están completamente correlacionadas, entonces $\mathcal{I}(X : Y) = H(X) = H(Y)$. En general, vale que

$$0 \leq \mathcal{I}(X : Y) \leq \min\{H(X), H(Y)\}. \quad (4.11)$$

En teoría de la información cuántica, la información mutua de un estado bipartito descrito por un operador densidad ρ_{AB} se define de forma completamente análoga:

$$\boxed{\mathcal{I}(\rho_{AB}) \doteq S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB})}, \quad (4.12)$$

donde $\rho_{A,B}$ son los operadores densidad reducidos de los subsistemas A y B , respectivamente, y $S(\rho) = -\text{tr}[\rho \ln \rho]$ es la entropía de von Neumann, que es la contraparte directa de la entropía de Shannon. Si bien la información mutua en el caso cuántico sigue siendo una medida de las correlaciones entre A y B , su interpretación no es tan directa como en el caso clásico. Esto es porque, como demostraron Araki y Lieb en la Ref. [60], la información mutua para estados cuánticos puede llegar a valer $2 \min\{S(\rho_A), S(\rho_B)\}$ (por ejemplo, para estados entrelazados toma ese valor). De hecho, en general se cumple que

$$0 \leq \mathcal{I}(\rho_{AB}) \leq 2 \min\{S(\rho_A), S(\rho_B)\}. \quad (4.13)$$

Notar el 2 extra en la cota de la Ec. (4.13) respecto a la cota clásica en la Ec. (4.11). Es decir, no solo cuantifica las correlaciones que son obtenidas simplemente realizando mediciones locales en una base específica y comparando los resultados, sino que también contiene una componente que no puede ser directamente observada de esta manera. Esta componente son las llamadas *correlaciones cuánticas* y son capturadas por la discordia cuántica, que presentaremos más abajo. La información mutua para un estado bipartito Gaussiano con matriz de covariancia dada por la Ec. (4.6) puede ser fácilmente obtenida como [57]

$$\mathcal{I}(\boldsymbol{\sigma}) = f(\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}}) + f(\sqrt{\det \boldsymbol{\beta}}) - f(\lambda_+) - f(\lambda_-), \quad (4.14)$$

donde $f(x) = (x + 1/2)\ln(x + 1/2) - (x - 1/2)\ln(x - 1/2)$ y λ_{\pm} son los autovalores simplécticos de $\boldsymbol{\sigma}$,

$$\lambda_{\pm} = \sqrt{\frac{\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 - 4 \det \boldsymbol{\sigma}}}{2}}, \quad (4.15)$$

con $\Delta = \det \boldsymbol{\alpha} + \det \boldsymbol{\beta} + 2 \det \boldsymbol{\gamma}$. Es interesante notar que una condición suficiente para que una matriz de covariancia represente a un estado físico es que ambos autovalores simplécticos sean mayores a un medio: $\lambda_{\pm} \geq 1/2$ [57].

4.2.2 Discordia cuántica

La discordia cuántica surge de la necesidad de cuantificar el exceso de correlaciones medidas por la información mutua en el caso cuántico respecto al clásico (comparar las Ecs. (4.11) y (4.13)). El hecho de que $\mathcal{I}(\rho_{AB}) \leq 2 \min\{S(\rho_A), S(\rho_B)\}$ refleja la existencia de correlaciones más allá de las que pueden ser inferidas con observaciones locales, que llamaremos *correlaciones cuánticas*. Esta medida fue originalmente propuesta por Ollivier y Zurek [61] y Henderson y Vedral [62] casi simultáneamente en un esfuerzo por explicar una serie de trabajos que desafiaban la creencia de que el entrelazamiento era la única forma de correlación cuántica [63, 64, 65]. Recientemente se ha demostrado que la presencia de discordia cuántica es una propiedad de la que gozan casi todos los estados cuánticos [66] (es decir, el conjunto de estados cuya discordia cuántica es nula tiene medida cero y no es denso en ninguna parte), y ha atraído considerable atención [67, 68, 69, 70, 71].

La discordia cuántica se define cuantizando la diferencia, o *discordancia*, entre dos medidas de información mutua que son clásicamente equivalentes:

$$\mathcal{I}(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y) \quad (4.16)$$

y

$$\mathcal{J}(X : Y) = H(X) - H(X|Y). \quad (4.17)$$

Clasicamente la entropía condicional se puede escribir como $H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y)$, por lo que $\mathcal{I}(X : Y) = \mathcal{J}(X : Y)$. La discrepancia entre \mathcal{I} y \mathcal{J} en el caso cuántico ocurre porque el cómputo de la entropía condicional $S(\rho_A|\rho_B)$, el análogo a $H(X|Y)$, involucra una elección de una base específica para realizar una medición en el subsistema B con el objetivo de inferir el estado de A . Por ende, la cuantización de \mathcal{J} no es tan directa como la de \mathcal{I} , que se obtenía simplemente reemplazando la entropía de Shannon por la de von Neumann. Para ello, entonces, se realiza una minimización sobre todas las medidas que toman valores sobre operadores semidefinidos positivos (*positive operator-valued measures* o POVMs en inglés) que corresponden a una medición en el subsistema B . De esta forma se encuentra aquella que perturbe lo mínimo posible al estado global y, al mismo tiempo, permita extraer el máximo posible de información sobre B . Luego, el análogo cuántico de \mathcal{J} se define como

$$\overleftarrow{\mathcal{J}}(\rho_{AB}) \doteq S(\rho_A) - \inf_{\{\Pi_n\}} \left[\sum_n p_n S(\rho_A|n) \right], \quad (4.18)$$

donde $\{\Pi_n\}$ es la POVM, $p_n = \text{tr}(\rho_B \Pi_n)$ es la probabilidad de obtener el resultado n , y $S(\rho_A|n)$ es la entropía de von Neumann del estado reducido de A luego de obtener este resultado. Finalmente, la discordia cuántica se define como

$$\overleftarrow{D}(\rho_{AB}) \doteq \mathcal{I}(\rho_{AB}) - \overleftarrow{\mathcal{J}}(\rho_{AB}). \quad (4.19)$$

Como vemos por su definición en la Ec. (4.18), al realizar mediciones locales sobre el subsistema B , $\overleftarrow{\mathcal{J}}$ solo tiene en cuenta las correlaciones clásicas, que es la cantidad de información que puedo obtener sobre A mirando solo a B , mientras que \mathcal{I} tiene en cuenta todas las correlaciones, sin importar su naturaleza. Entonces, \overleftarrow{D} , definida como en la Ec. (4.19), es la diferencia entre las correlaciones totales y las correlaciones clásicas. Las flechas arriba de \mathcal{J} y D que apuntan hacia la izquierda en las Ecs. (4.18) y (4.19), respectivamente, indican que la medición se está realizando sobre el subsistema B para inferir el estado de A , y refleja el hecho de que ni $\overleftarrow{\mathcal{J}}$ ni \overleftarrow{D} son simétricas.

Inicialmente definida solo para sistemas de dimensión finita, la discordia cuántica fue extendida a sistemas continuos y, en particular, al caso de estados Gaussianos bipartitos [72, 73]. Cuando se restringen las POVMs en la minimización de la Ec. (4.18) al conjunto de mediciones Gaussianas, a la Ec. (4.19) se la conoce como discordia cuántica Gaussiana. Hasta hace poco se pensaba que ésta era solo una cota superior para la discordia cuántica en sistemas continuos pero, de hecho, se demostró que la discordia cuántica Gaussiana y la discordia cuántica son iguales para estados Gaussianos [74]. En nuestro caso, se puede calcular facilmente como

$$\overleftarrow{D}(\boldsymbol{\sigma}) = f(\sqrt{\det \boldsymbol{\beta}}) - f(\lambda_+) - f(\lambda_-) + f(\sqrt{E_{\text{mín}}}), \quad (4.20)$$

donde f y λ_{\pm} son los definidos en la **Sección 4.2.1** y

$$E_{\text{mín}} = \begin{cases} \frac{2C^2 + (1/4 - B)(A - 4D) + 2|C|\sqrt{C^2 + (1/4 - B)(A - 4D)}}{4(1/4 - B)^2} & (D - AB)^2 \leq (1/4 + B)C^2(A + 4D) \\ \frac{AB - C^2 + D - \sqrt{C^4 + (D - AB)^2 - 2C^2(AB + D)}}{2B} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (4.21)$$

Arriba usamos la notación estándar $A = \det \boldsymbol{\alpha}$, $B = \det \boldsymbol{\beta}$, $C = \det \boldsymbol{\gamma}$ y $D = \det \boldsymbol{\sigma}$.

4.2.3 Negatividad logarítmica

Como medida de entrelazamiento vamos a utilizar la negatividad logarítmica,

$$E_N = \ln \|\tilde{\rho}_{AB}\|_1 \quad (4.22)$$

donde $\tilde{\rho}_{AB}$ es el operador densidad traspuesto parcialmente, es decir, solo el subsistema B, y $\|\cdot\|_1$ la norma 1 usual de operadores. La negatividad logarítmica cuantifica la violación del criterio de separabilidad de Peres-Horodecki [75, 76] y es monótona bajo operaciones locales y comunicación clásica [77]. En nuestro caso, en el que A y B son bandas individuales, este criterio es una condición necesaria y suficiente para que el sistema compuesto sea separable. Además de ser sencilla de calcular, E_N es una cota superior al entrelazamiento destilable de ρ_{AB} y está relacionada al costo de entrelazar utilizando operaciones que preserven la positividad de la traspuesta parcial [78].

Para estados Gaussianos de dos modos, la negatividad logarítmica se calcula como

$$E_N = \max\{0, -\ln(2\tilde{\lambda}_-)\}, \quad (4.23)$$

donde $\tilde{\lambda}_-$ es el menor autovalor simpléctico de la matriz de covariancia $\tilde{\sigma}_{AB}$ correspondiente a $\tilde{\rho}_{AB}$,

$$\tilde{\lambda}_- = \sqrt{\frac{\tilde{\Delta} - \sqrt{\tilde{\Delta}^2 - 4 \det \sigma}}{2}}, \quad (4.24)$$

con $\tilde{\Delta} = \det \alpha + \det \beta - 2 \det \gamma$. El menor autovalor simpléctico $\tilde{\lambda}_-$ completamente caracteriza y cuantifica el entrelazamiento de un estado Gaussiano de dos modos: si $\tilde{\lambda}_- \geq 1/2$ el estado es separable, y si $\tilde{\lambda}_- < 1/2$, entonces está entrelazado. Cualquier medida de entrelazamiento disponible para estados Gaussianos de dos modos solo cuantifica la violación de esta desigualdad. Notar que $\det \gamma < 0$ es una condición necesaria, pero no suficiente, para que el estado esté entrelazado.

4.3 Matriz de covariancia a tiempos largos

En esta sección vamos a mostrar cómo es la matriz de covariancia σ para dos bandas de los reservorios, una centrada en $\omega_i \in \mathcal{E}_R$ y otra en $\omega_j \in \mathcal{E}_L$. En particular, como nuestro objetivo es estudiar la producción de correlaciones más allá del régimen transitorio, nos va a interesar el comportamiento de σ a tiempos largos. Mostraremos las expresiones explícitas de las matrices α , β y γ (ver Ec. (4.6)), dejando las cuentas para el **Apéndice B**.

La matriz de covariancia σ se puede descomponer como una suma de cuatro contribuciones,

$$\sigma(t) = \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_j + \sigma_0(t) + \sigma_{\text{osc}}(t) + \sigma_{\text{lin}} \times t, \quad (4.25)$$

donde:

- $\mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_j$ corresponde al estado inicial térmico de cada banda:

$$\mathbf{v}_{i,j} = \coth\left(\frac{\hbar\omega_{i,j}}{2k_B T_{R,L}}\right) \mathbb{1}_{2 \times 2} \quad (4.26)$$

- $\sigma_0(t)$ depende solo del estado inicial de \mathcal{S} y tiende a cero exponencialmente rápido a tiempos largos.
- $\sigma_{\text{osc}}(t)$ oscila en el tiempo con la misma frecuencia que el potencial externo.
- $\sigma_{\text{lin}} \times t$ es lineal en el tiempo

Como dijimos al principio de esta sección, estamos interesados en estudiar los procesos físicos que constantemente crean correlaciones más allá del régimen transitorio. Por lo tanto, sólo vamos a conservar los términos de σ que no se anulen al calcular su promedio en un período del potencial externo a tiempos largos, más el término inicial $\mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_j$ pues vamos a trabajar a primer orden en la constante de acoplamiento γ_0 . Entonces, no vamos a trabajar con σ completa, sino que con la matriz

$$\sigma_{\text{av}}(t) = \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_j + \sigma_{\text{lin}} \times t. \quad (4.27)$$

Antes de estudiar más en detalle σ_{av} , queremos hacer énfasis en que el término lineal que aparece en las Ecs. (4.25) y (4.27), y el hecho de que $\sigma_0(t)$ tienda a cero a tiempos largos, es consecuencia directa de trabajar con reservorios continuos como describimos en la **Sección 2.4**. Para reservorios discretos esas dos propiedades de σ_{av} no son válidas. A continuación vamos a detallar a las submatrices que componen a la matriz σ_{av} (las cuentas para llegar a esas expresiones están hechas en el **Apéndice B**). Las matrices α_{av} y β_{av} son escalares,

$$\alpha_{\text{av}}(t) = \alpha_{\text{av}}(t) \mathbb{1}_{2 \times 2} \quad (4.28)$$

$$\beta_{\text{av}}(t) = \beta_{\text{av}}(t) \mathbb{1}_{2 \times 2} \quad (4.29)$$

donde las componentes están dadas por

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{av}}(t) = & \frac{1}{2} + n_R(\omega_i) \\ & + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(\omega_i - n\omega_d) I_\beta(\omega_i - n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)]|^2 \\ & \times [n_\beta(\omega_i - n\omega_d) - n_R(\omega_i)] \times t \\ & + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(n\omega_d - \omega_i) I_\beta(n\omega_d - \omega_i) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)]|^2 \\ & \times [n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + n_R(\omega_i) + 1] \times t \end{aligned} \quad (4.30)$$

y

$$\begin{aligned} \beta_{\text{av}}(t) = & \frac{1}{2} + n_L(\omega_j) \\ & + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta, n} \Theta(\omega_j + n\omega_d) I_\beta(\omega_j + n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_j + n\omega_d)]|^2 \\ & \times [n_\beta(\omega_j + n\omega_d) - n_L(\omega_j)] \times t \\ & + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta, n} \Theta(n\omega_d - \omega_j) I_\beta(n\omega_d - \omega_j) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_j)]|^2 \\ & \times [n_\beta(n\omega_d - \omega_j) + n_L(\omega_j) + 1] \times t. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Arriba llamamos Θ a la función escalón de Heaviside, que es igual a uno si el argumento es positivo, o igual a cero si es negativo. Más interesante es la matriz $\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}$ que almacena las correlaciones entre las bandas. Como mostramos en el **Apéndice B**, $\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}$ es distinta de cero solo en dos casos: si $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$ o si $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$. Es decir, solo hay correlaciones si entre las bandas hay transporte de excitaciones debido a los procesos resonantes, que es el caso $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$, o si se crea un par de excitaciones debido a los procesos no resonantes, y una de las excitaciones es depositada en una banda y la otra, en la otra banda, en cuyo caso se cumple $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$. Esos son los dos únicos casos en que continuamente se crean correlaciones entre bandas más allá del régimen transitorio. Si las bandas no están conectadas por ninguno de esos dos procesos, entonces no se van a crear correlaciones netas a medida que transcurre el tiempo. Los elementos de matriz de $\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}$, a tiempos largos y en el límite de acoplamiento débil, para el caso $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$ son

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{\text{av},11}(t) &= -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
&\quad \times \text{Im} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_{-k}(i\omega_i)e^{-ik\omega_d t} + [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}(i\omega_j)e^{-ik\omega_d t} \right\} \times t \\
\boldsymbol{\gamma}_{\text{av},22}(t) &= \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
&\quad \times \text{Im} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_{-k}(i\omega_i)e^{-ik\omega_d t} + [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}(i\omega_j)e^{-ik\omega_d t} \right\} \times t \\
\boldsymbol{\gamma}_{\text{av},12}(t) &= \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
&\quad \times \text{Re} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_{-k}(i\omega_i)e^{-ik\omega_d t} + [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}(i\omega_j)e^{-ik\omega_d t} \right\} \times t \\
\boldsymbol{\gamma}_{\text{av},21}(t) &= \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
&\quad \times \text{Re} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_{-k}(i\omega_i)e^{-ik\omega_d t} + [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}(i\omega_j)e^{-ik\omega_d t} \right\} \times t,
\end{aligned} \tag{4.32}$$

mientras que en el caso $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$ tenemos

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{\text{av},11}(t) &= \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
&\quad \times \text{Im} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_k(i\omega_i)e^{ik\omega_d t} - [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)e^{ik\omega_d t} \right\} \times t \\
\boldsymbol{\gamma}_{\text{av},22}(t) &= \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
&\quad \times \text{Im} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_k(i\omega_i)e^{ik\omega_d t} - [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)e^{ik\omega_d t} \right\} \times t \\
\boldsymbol{\gamma}_{\text{av},12}(t) &= \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
&\quad \times \text{Re} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_k(i\omega_i)e^{ik\omega_d t} - [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)e^{ik\omega_d t} \right\} \times t \\
\boldsymbol{\gamma}_{\text{av},21}(t) &= -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
&\quad \times \text{Re} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_k(i\omega_i)e^{ik\omega_d t} - [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)e^{ik\omega_d t} \right\} \times t.
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Al calcular funciones de la matriz $\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}$ (por ejemplo, su determinante) para el caso resonante (en el cual $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$) hay que suplantarlo a los elementos mostrados en la Ec. (4.33) con

la relación extra

$$\boxed{\tilde{A}_k(i\omega_i) - \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) = -i\pi \sum_n I(\omega_i - n\omega_d) \tilde{A}_n^*[i(\omega_i - n\omega_d)] \tilde{A}_{n+k}[i(\omega_i - n\omega_d)]}, \quad (4.34)$$

que elimina términos de mayor orden en γ_0 .

4.3.1 Autovalores simplécticos

Como vimos en la **Sección 4.2**, para calcular las distintas medidas de correlaciones necesitamos los autovalores simplécticos de σ_{av} y $\tilde{\sigma}_{av}$, la matriz de covariancia normal y la matriz de covariancia correspondiente al operador densidad traspuesto parcialmente, respectivamente. Estos autovalores se calculan como:

$$\lambda_{\pm} = \sqrt{\frac{\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 - 4 \det \sigma_{av}}}{2}}, \quad (4.35)$$

y

$$\tilde{\lambda}_{\pm} = \sqrt{\frac{\tilde{\Delta} \pm \sqrt{\tilde{\Delta}^2 - 4 \det \sigma_{av}}}{2}}, \quad (4.36)$$

con $\Delta = \det \alpha_{av} + \det \beta_{av} + 2 \det \gamma_{av}$ y $\tilde{\Delta} = \det \alpha_{av} + \det \beta_{av} - 2 \det \gamma_{av}$. En el **Apéndice B** están los cálculos necesarios para obtener los autovalores en función de las cantidades mostradas anteriormente. Acá solo presentaremos las expresiones. Para el caso no resonante tenemos

$$\boxed{\begin{aligned} \lambda_+ &= \sqrt{\det \alpha_{av}} + \frac{\det \gamma_{av}}{\sqrt{\det \alpha_{av}} + \sqrt{\det \beta_{av}}} \\ \lambda_- &= \sqrt{\det \beta_{av}} + \frac{\det \gamma_{av}}{\sqrt{\det \alpha_{av}} + \sqrt{\det \beta_{av}}} \end{aligned}} \quad (4.37)$$

y para el resonante,

$$\boxed{\begin{aligned} \lambda_+ &= \sqrt{\det \alpha_{av}} + \frac{\det \gamma_{av}}{\sqrt{\det \alpha_{av}} - \sqrt{\det \beta_{av}}} \\ \lambda_- &= \sqrt{\det \beta_{av}} - \frac{\det \gamma_{av}}{\sqrt{\det \alpha_{av}} - \sqrt{\det \beta_{av}}}. \end{aligned}} \quad (4.38)$$

Notar que, si $\gamma_0 = 0$, entonces $\det \gamma_{av} = 0$ y recuperamos los autovalores simplécticos correspondientes a una matriz totalmente descorrelacionada. Por otro lado, el menor autovalor simpléctico de $\tilde{\sigma}_{av}$, necesario para estudiar el entrelazamiento entre bandas, para el caso no resonante (para el resonante no es necesario pues, como veremos más adelante, esas bandas no están entrelazadas) es

$$\boxed{\tilde{\lambda}_- \simeq \sqrt{\frac{1}{2}(\det \alpha_{av} + \det \beta_{av}) \left(1 - \frac{\sqrt{\det \alpha_{av}} + \sqrt{\det \beta_{av}}}{\det \alpha_{av} + \det \beta_{av}} \sqrt{|\det \gamma_{av}|} \right)}}. \quad (4.39)$$

Con estas cantidades ya se pueden calcular las medidas de correlaciones presentadas en la sección anterior.

4.4 Estudio de las correlaciones

En esta sección vamos a utilizar los resultados anteriores para estudiar las tres medidas de correlaciones que mostramos en la **Sección 4.2**: información mutua, discordia cuántica y negatividad logarítmica. Las expresiones van a estar escritas solo en término de tres invariantes simplécticos físicamente relevantes. Dos de ellos son las purezas individuales de los estados reducidos,

$$\mu_i = \text{tr} \rho_i^2 = \frac{1}{2\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}}} \quad (4.40)$$

y

$$\mu_j = \text{tr} \rho_j^2 = \frac{1}{2\sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}}, \quad (4.41)$$

que miden qué tan mixtos son los estados, y el otro invariante es

$$\Gamma(t) \doteq 4 \det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}} \quad (4.42)$$

que, como explicaremos más abajo, puede ser interpretado como el objeto que genera a las correlaciones entre las bandas. Utilizando las Ecs. (4.30), (4.31), (4.33) y (4.32) podemos escribir explícitamente esos tres invariantes:

$$\begin{aligned} 1/\mu_i &= 1 + 2n_R(\omega_i) \\ &+ \pi \Delta \omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(\omega_i - n\omega_d) \\ &\times I_\beta(\omega_i - n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)]|^2 [n_\beta(\omega_i - n\omega_d) - n_R(\omega_i)] \times t \\ &+ \pi \Delta \omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(n\omega_d - \omega_i) \\ &\times I_\beta(n\omega_d - \omega_i) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)]|^2 [n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + n_R(\omega_i) + 1] \times t \end{aligned} \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} 1/\mu_j &= 1 + 2n_L(\omega_j) \\ &+ \pi \Delta \omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta, n} \Theta(\omega_j + n\omega_d) \\ &\times I_\beta(\omega_j + n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_j + n\omega_d)]|^2 [n_\beta(\omega_j + n\omega_d) - n_L(\omega_j)] \times t \\ &+ \pi \Delta \omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta, n} \Theta(n\omega_d - \omega_j) \\ &\times I_\beta(n\omega_d - \omega_j) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_j)]|^2 [n_\beta(n\omega_d - \omega_j) + n_L(\omega_j) + 1] \times t, \end{aligned} \quad (4.44)$$

$$\Gamma_+(t) = -\Delta \omega^2 I_R(\omega_i) I_L(\omega_j) \left| [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_i) + [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_j) \right|^2 \times t^2, \quad (4.45)$$

para el caso no resonante ($\omega_i + \omega_j = k\omega_d$), y

$$\Gamma_-(t) = \Delta \omega^2 I_R(\omega_i) I_L(\omega_j) \left| n_R(\omega_i) \tilde{A}_k(i\omega_i) - n_L(\omega_j) \tilde{A}_k^*(i\omega_j) \right|^2 \times t^2, \quad (4.46)$$

para el resonante ($\omega_j = \omega_i + k\omega_d$). De ahora en más, el subíndice más (por ejemplo, $\Gamma_+(t)$) va a indicar el caso no resonante, mientras que el menos va a indicar el caso resonante.

A pesar de que, como vemos en las Ecs.(4.43) y (4.44), las purezas individuales μ_i y μ_j son funciones del tiempo (ambas decrecen a medida que pasa el tiempo), en el límite de acoplamiento débil sus valores están mayormente determinados por las temperaturas de sus respectivos reservorios. Es decir, la condición $\mu_i \rightarrow 1$ indica que la temperatura T_R es baja (estrictamente que $\hbar\omega_i/k_B T_R \gg 1$), mientras que $\mu_i \rightarrow 0$ indica que T_R es alta ($\hbar\omega_i/k_B T_R \ll 1$). Por otro lado, $\Gamma_{\pm}(t)$ es una función cuadrática del tiempo que, como dijimos antes, puede ser interpretada como el objeto que genera las correlaciones. Esto es así porque la divergencia de Kullback-Leibler entre la densidad de cuasiprobabilidad de Wigner del estado total $\rho_{\sigma_{av}}$ y la densidad de cuasiprobabilidad de Wigner del producto de los marginales $\rho_{\alpha_{av}} \otimes \rho_{\beta_{av}}$ puede ser escrita como [58]:

$$D_{KL}(W_{\rho_{\sigma_{av}}} || W_{\rho_{\alpha_{av}} \otimes \rho_{\beta_{av}}}) = \mu_i \mu_j |\Gamma_{\pm}(t)|. \quad (4.47)$$

Esta divergencia mide qué tan distinguibles son $\rho_{\sigma_{av}}$ y $\rho_{\alpha_{av}} \otimes \rho_{\beta_{av}}$ en el espacio de fases. Como vemos en la Ec. (4.47), si bien las purezas decrecen a medida que pasa el tiempo, $|\Gamma_{\pm}(t)|$ crece cuadráticamente, haciendo al estado total $\rho_{\sigma_{av}}$ más y más distinguible respecto al estado completamente descorrelacionado $\rho_{\alpha_{av}} \otimes \rho_{\beta_{av}}$. En este sentido es en el que decimos que $\Gamma_{\pm}(t)$ es el responsable de generar las correlaciones.

A continuación vamos a estudiar cada una de las medidas de correlaciones que presentamos antes individualmente y en orden creciente de cuanticidad. Comenzaremos por la información mutua, seguiremos por la discordia cuántica y finalizaremos con el entrelazamiento. Los cálculos necesarios para llegar a las expresiones que vamos a mostrar están detallados en el **Apéndice B**.

4.4.1 Información mutua

Comenzamos nuestro estudio de las correlaciones con la información mutua \mathcal{I} , que recordamos es una medida de las correlaciones totales, clásicas y cuánticas, entre las bandas. Para ambos casos, resonante (signo $-$) y no resonante (signo $+$), \mathcal{I} tiene la misma forma simple:

$$\mathcal{I}_{\pm}(\sigma_{av}) = f_{\pm}(\mu_i, \mu_j) |\Gamma_{\pm}(t)|, \quad (4.48)$$

donde

$$f_{\pm}(\mu_i, \mu_j) = \mu_i \mu_j \frac{\operatorname{atanh}(\mu_i) \pm \operatorname{atanh}(\mu_j)}{\mu_i \pm \mu_j}. \quad (4.49)$$

A pesar de que la Ec. (4.48) da la impresión de que la información mutua crece cuadráticamente en el tiempo como $|\Gamma_{\pm}(t)|$, ese no es el caso. La razón es que, mientras $|\Gamma_{\pm}(t)|$ aumenta, f_{\pm} es una función monótonicamente decreciente de las purezas individuales. Más aun, para el caso resonante ($\omega_j = \omega_i + k\omega_d$) se puede ver que

$$|\Gamma_{-}(t)| \leq \frac{1}{\mu_i \mu_j} (1 - \mu_i)(1 - \mu_j) \quad (4.50)$$

(esta desigualdad está demostrada en el **Apéndice B**) y, en consecuencia, la información mutua está acotada: $\mathcal{I}_{-} \leq 1$. Por lo tanto, el crecimiento cuadrático en el tiempo eventualmente debe frenar e \mathcal{I}_{-} debe llegar a un valor de saturación. Parece ser que la generación de correlaciones mediante el transporte de excitaciones no puede incrementar la información mutua entre las bandas a valores arbitrariamente grandes. Por el contrario, en el caso

no resonante ($\omega_i + \omega_j = k\omega_d$) la cota de la Ec. (4.50) no es válida. Éste es un resultado esperado si tenemos en cuenta que este proceso continuamente crea pares de excitaciones que correlacionan a las bandas. Sin embargo, sí existe un régimen en que la información mutua crece de forma aproximadamente cuadrática en el tiempo. Para tiempos largos pero no tan largos, de modo que las perezas individuales se mantengan relativamente constantes, f_{\pm} se mantiene constante también y la información mutua crece como $|\Gamma_{\pm}(t)|$.

Con lo anterior en mente, la Ec. (4.48) tiene una interpretación física clara: la información mutua crece debido a la creación de correlaciones entre las bandas a cargo de $|\Gamma_{\pm}(t)|$, pero este incremento es contrarrestado por las agitaciones térmicas del reservorio, que están representadas por f_{\pm} . Ciertamente, a medida que pasa el tiempo o la temperatura aumenta las bandas se correlacionan progresivamente más con el resto del reservorio, disminuyendo su dependencia mutua, que es exactamente lo que cuantifica \mathcal{I} . Más aún, debido a que $f_+ < f_-$, el efecto de las agitaciones térmicas en el reservorio es más perjudicial para las bandas que están correlacionadas por la creación de pares de excitación no resonante ($\omega_i + \omega_j = k\omega_d$) que las que están correlacionadas por el más *clásico* transporte de excitaciones resonante ($\omega_j = \omega_i + k\omega_d$). Es decir, el transporte de excitaciones crea correlaciones más robustas ante perturbaciones del reservorio que la creación de pares de excitaciones. La información mutua (junto con la discordia cuántica y la negatividad logarítmica) para distintos valores de temperaturas está graficada en las Figs. 4.2 y 4.3 para el caso resonante y no resonante, respectivamente.

Hay una característica interesante para notar en $\Gamma_-(t)$, cuya forma es

$$\Gamma_-(t) = \Delta\omega^2 I_R(\omega_i) I_L(\omega_j) |n_R(\omega_i) \tilde{A}_k(i\omega_i) - n_L(\omega_j) \tilde{A}_k^*(i\omega_j)|^2 \times t^2. \quad (4.51)$$

En el caso resonante, el transporte de excitaciones puede ir en ambos sentidos (es decir, de ω_i a $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$ o al revés) dependiendo de si un paquete de energía es absorbido desde o emitido hacia el potencial externo. Debido a que las excitaciones se comportan como cuasipartículas idénticas, ocurre un efecto de interferencia que provoca que las correlaciones generadas por la absorción tiendan a cancelar las generadas por la emisión. Efectivamente, el caso en que ninguna excitación fue transportada es indistinguible del caso en que el mismo número de excitaciones fue transportada en ambos sentidos. En particular, cuando las bandas tienen el mismo número de ocupación (es decir, $n_R(\omega_i) = n_L(\omega_j)$), la absorción y la emisión son equiprobables y la información mutua tiende a desvanecer. Ésto se ve reflejado en el hecho de que $\Gamma_-(t)$ se vuelve arbitrariamente chico, como muestra la Ec. (4.51) e ilustramos en la Fig. 4.2 (c) (notar la escala del eje vertical).

Considerando que el mecanismo de creación de pares de excitaciones es el proceso dominante a bajas temperaturas, la intuición física nos indica que en ese caso la información mutua entre las bandas correlacionadas por éste debería ser mayor que la información mutua de las bandas correlacionadas mediante el transporte de excitaciones. Analizando $\Gamma_{\pm}(t)$, podemos ver que éste es de hecho el caso. En contraposición al caso no resonante, en el caso resonante Γ_- tiende a cero a medida que las temperaturas de los reservorios tienen a cero. Cuando la temperatura de éstos es nula, las bandas no están pobladas y el potencial externo no puede transportar excitaciones de una hacia la otra.

4.4.2 Discordia cuántica

Ahora pasamos a estudiar la discordia cuántica entre bandas. Vamos a analizar el cociente \overline{D}/\mathcal{I} , que representa la cantidad de correlaciones cuánticas en relación a la totalidad de las correlaciones. Éste está dado por

$$\frac{\overline{D}_{\pm}(\sigma_{\text{av}})}{\mathcal{I}_{\pm}(\sigma_{\text{av}})} = 1 - g_{\pm}(\mu_i, \mu_j) \quad (4.52)$$

donde

$$g_{\pm}(\mu_i, \mu_j) = \frac{1}{1 + \mu_j} \left(1 \pm \frac{\mu_j}{\mu_i} \right) \left[1 \pm \frac{\text{atanh}(\mu_j)}{\text{atanh}(\mu_i)} \right]^{-1}. \quad (4.53)$$

Notar que $0 \leq g_{\pm} \leq 1$ y es una función monótonicamente creciente de las purzas individuales. Debido a que $g_+ > g_-$, se sigue que $\overline{D}_+/\mathcal{I}_+ < \overline{D}_-/\mathcal{I}_-$. Es decir, la fracción de correlaciones cuánticas en la información mutua entre las bandas correlacionadas por la creación de pares de excitaciones no resonante es menor que la fracción de correlaciones cuánticas en la información mutua entre las bandas correlacionadas por el transporte resonante de excitaciones. Sin embargo, es posible que la discordia cuántica en el caso no resonante sea mayor que la del caso resonante ($\overline{D}_+ > \overline{D}_-$). Por ejemplo, ese es el caso en el límite de bajas temperaturas, donde \mathcal{I}_- tiende a cero pero \mathcal{I}_+ no. Como consecuencia de que la información mutua en el caso resonante está acotada, la discordia cuántica también lo está: $\overline{D}_- \leq 1$. Este resultado fue previamente obtenido en las Refs. [72] y [73] al estudiar la discordia cuántica entre estados térmicos *squeezados*. Ésto sería un indicio de que los procesos resonantes están generando ese tipo de estados entre las bandas.

A continuación vamos a proporcionar algunos ejemplos que ilustran los resultados previos en dos regímenes distintos: ambos reservorios a alta y a baja temperatura. Vamos a expresar los resultados en términos de la pureza media $\bar{\mu} = (\mu_i + \mu_j)/2$ y trabajar a primer orden no trivial en $\Delta\mu/\bar{\mu} \ll 1$, donde $\Delta\mu = (\mu_i - \mu_j)/2$. Es decir, estamos suponiendo que $\bar{\mu} \gg \Delta\mu$, lo que no implica necesariamente que $\mu_i \simeq \mu_j$. El cociente \overline{D}/\mathcal{I} para los casos no resonante y resonante es, respectivamente,

$$\frac{\overline{D}_+(\sigma_{\text{av}})}{\mathcal{I}_+(\sigma_{\text{av}})} \simeq \frac{\bar{\mu}}{1 + \bar{\mu}} \quad (4.54)$$

y

$$\frac{\overline{D}_-(\sigma_{\text{av}})}{\mathcal{I}_-(\sigma_{\text{av}})} \simeq 1 - \frac{1}{\bar{\mu}}(1 - \bar{\mu})\text{atanh}(\bar{\mu}). \quad (4.55)$$

Como podemos ver en las Ecs. (4.54) y (4.55), a altas temperaturas, cuando $\bar{\mu} \rightarrow 0$, ambas expresiones tienden a cero ($\overline{D}/\mathcal{I} \rightarrow 0$), indicando que las agitaciones térmicas en los reservorios hacen desaparecer las correlaciones cuánticas. En el otro límite en que $\bar{\mu} \rightarrow 1$ (el límite de bajas temperaturas), tenemos $\overline{D}_+/\mathcal{I}_+ \rightarrow 1/2$ y $\overline{D}_-/\mathcal{I}_- \rightarrow 1$. Para el caso no resonante, eso significa que la mitad de las correlaciones son de origen cuántico. Esto puede ser interpretado de la forma siguiente. Para este sistema cuántico de dos bandas, la información mutua está acotada como $\mathcal{I}_+ \leq 2S_{\bar{\mu}}$ (desigualdad de Araki-Lieb con $S_{\bar{\mu}}$ la entropía de von Neumann de una banda *promedio* representada por $\bar{\mu}$), mientras que para un sistema clásico análogo la cota sería $\mathcal{I}_+ \leq S_{\bar{\mu}}$. Por lo tanto, el límite anterior ($\overline{D}_+/\mathcal{I}_+ \rightarrow 1/2$) parece

indicar que el mecanismo de creación de pares de excitaciones a temperatura cero satura la desigualdad de Araki-Lieb. Entonces, tenemos $\mathcal{I}_+ \rightarrow 2S_{\bar{\mu}}$ y, cualitativamente, la mitad de la información mutua, $0 < \mathcal{I}_+ \leq S_{\bar{\mu}}$, corresponde a correlaciones clásicas, y la otra mitad, $S_{\bar{\mu}} < \mathcal{I}_+ \leq 2S_{\bar{\mu}}$, a correlaciones cuánticas. Esto se ve ilustrado en la Fig. 4.3 (a). Por otro lado, en el caso resonante la situación es distinta. Cuando $\bar{\mu} \rightarrow 1$, el transporte de excitaciones de una banda a la otra, que es el mecanismo que crea correlaciones, tiende a desaparecer (recordar que en este caso $\mathcal{I}_- \ll \mathcal{I}_+$), pero la pequeña cantidad de correlaciones que aun quedan tienen discordia no nula y satisfacen $\overleftarrow{D}_- \simeq \mathcal{I}_-$. Es decir, el remanente es de origen cuántico. A medida de que pasa el tiempo o la temperatura incrementa, las excitaciones van siendo transportadas de una banda a la otra, se empiezan a producir correlaciones clásicas y la discordia cuántica comienza a decrecer.

Debido a que la definición de discordia cuántica está basada en mediciones sobre uno de los subsistemas, es naturalmente asimétrica respecto al intercambio $\{i, R\} \leftrightarrow \{j, L\}$. Es interesante ver cómo esta asimetría se manifiesta en términos de las temperaturas de los reservorios. Por ejemplo, analicemos el caso resonante (el no resonante es análogo), y supongamos que uno de los reservorios está a baja temperatura y el otro está a alguna otra temperatura arbitraria, pero más alta que el anterior. Si \mathcal{E}_L es el que se encuentra a baja temperatura, entonces la Ec. (4.52) se puede aproximar como

$$\frac{\overleftarrow{D}_-(\sigma_{av})}{\mathcal{I}_-(\sigma_{av})} \simeq 1 - \frac{\mu_j}{2 \operatorname{atanh}(\mu_j)}. \quad (4.56)$$

La Ec. (4.56) muestra que la mayoría de las correlaciones son cuánticas en ese límite, independientemente de la temperatura de \mathcal{E}_R . En contraste, si \mathcal{E}_R es el que se encuentra a baja temperatura, entonces

$$\frac{\overleftarrow{D}_-(\sigma_{av})}{\mathcal{I}_-(\sigma_{av})} \simeq 2 \frac{\mu_j}{\mu_i}. \quad (4.57)$$

Si ahora incrementamos la temperatura de \mathcal{E}_L , entonces la discordia cuántica alcanza su valor mínimo: todas las correlaciones son clásicas. Como vemos de estos dos ejemplos, la cuantificación de las correlaciones medidas por la discordia cuántica depende mucho de cuál sea el sistema que se está observando. Esta diferencia se muestra en las Figs. 4.2 (b) y (c) para el caso resonante, donde mostramos explícitamente los límites de las Ecs. (4.56) y (4.57), y en las Figs. 4.3 (b) y (c) para el caso no resonante.

4.4.3 Negatividad logarítmica

Como vimos antes, en el caso resonante $\gamma_{av} > 0$ y, entonces, la negatividad logarítmica es nula. Es decir, las bandas que cumplen $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$, correlacionadas por el transporte de excitaciones de una hacia la otra, no están entrelazadas. Por lo tanto, vamos a enfocar nuestra atención en las bandas correlacionadas mediante la creación no resonante de pares de excitaciones, que cumplen $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$. Estas bandas están entrelazadas y la negatividad logarítmica es el máximo entre cero y

$$E_N(t) = -S_{ij} + \Gamma_N \times t, \quad (4.58)$$

donde

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\mu_i^2 + \mu_j^2}{2\mu_i^2 \mu_j^2} \right) \geq 0 \quad (4.59)$$

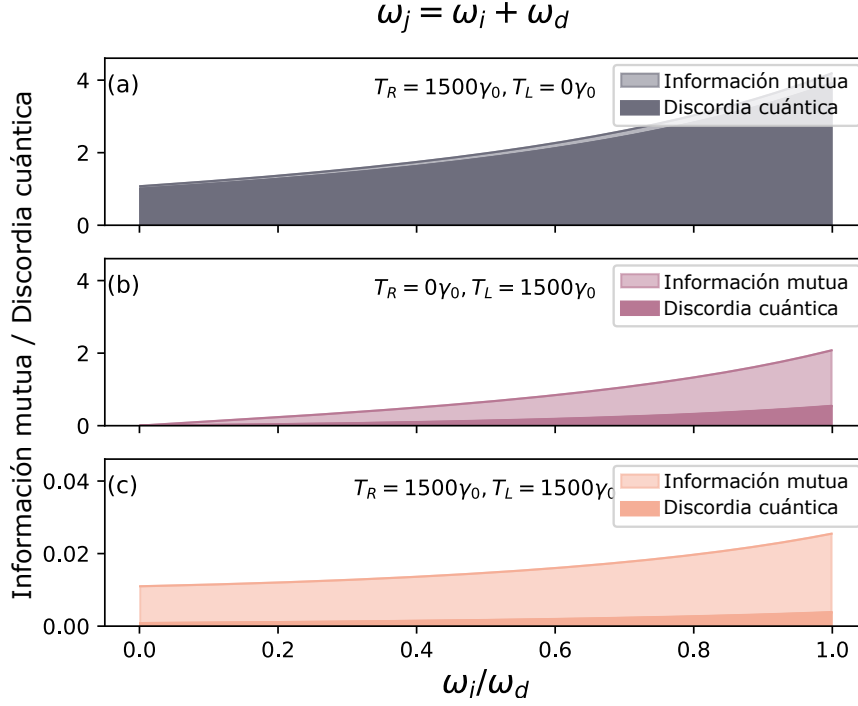


Figura 4.2: Dependencia de la información mutua y la discordia cuántica con la frecuencia ω_i para el caso resonante, con $\omega_j = \omega_i + \omega_d$. (a,b) La temperatura es elevada en uno de los dos reservorios hasta $T = 1500\gamma_0$, mientras que la otra es mantenida constante a $T = 0$. Ésto ilustra los límites mostrados en las Ecs. (4.56) y (4.57), respectivamente. (c) Ambas temperaturas son elevadas hasta $T = 7500\gamma_0$, mostrando que \mathcal{I}_- se vuelve arbitrariamente pequeña cuando los números de ocupación son similares (notar que la escala del eje vertical es cien veces más chica que la de los gráficos anteriores). El potencial externo y la densidad espectral son, respectivamente, $V(t) = \omega_r^2 + V\cos(\omega_d t)$ e $I(\omega) = 2M\gamma_0\omega\Lambda^2/\pi(\omega^2 + \Lambda^2)$. Los gráficos fueron normalizados utilizando $E_0 = \gamma_0\Delta\omega V t/\omega_r^3$ (graficamos \mathcal{I}_-/E_0^2 y \overline{D}_-/E_0^2). Los parámetros usados son $\omega_d = \omega_r/\sqrt{11}$, $\omega_r = 800\gamma_0$, $V = \omega_r^2/32$, $m = 10m_i$, $t = 20\gamma_0$ y $\gamma_0 = 0,005$.

y

$$\Gamma_N = \frac{1}{2\mu_i\mu_j}(\mu_i + \mu_j)e^{-2S_{ij}}\sqrt{|\Gamma_+|}, \quad (4.60)$$

donde definimos $\Gamma_+ \doteq \Gamma_+(t)/t$. Notar que Γ_+ es independiente del tiempo. Observamos que, análogamente a lo que sucede con la información mutua y la discordia cuántica, E_N no es lineal en el tiempo como sugiere la Ec. (4.58). La producción de entrelazamiento es lineal siempre y cuando las perezas individuales se mantengan aproximadamente constantes en el tiempo.

De la Ec. (4.58) vemos que la producción de entrelazamiento es una competencia entre la generación de correlaciones a cargo del mecanismo de creación de pares de excitaciones y las agitaciones térmicas de los reservorios que tratan de destruirlas. Estas agitaciones térmicas tienen dos efectos distintos en la negatividad logarítmica. Por un lado, reducen la tasa de generación de entrelazamiento Γ_N respecto de la tasa de generación de correlaciones totales Γ_+ ($\Gamma_N \leq \sqrt{|\Gamma_+|}$). Γ_N es función de las perezas individuales y alcanza su valor máximo cuando

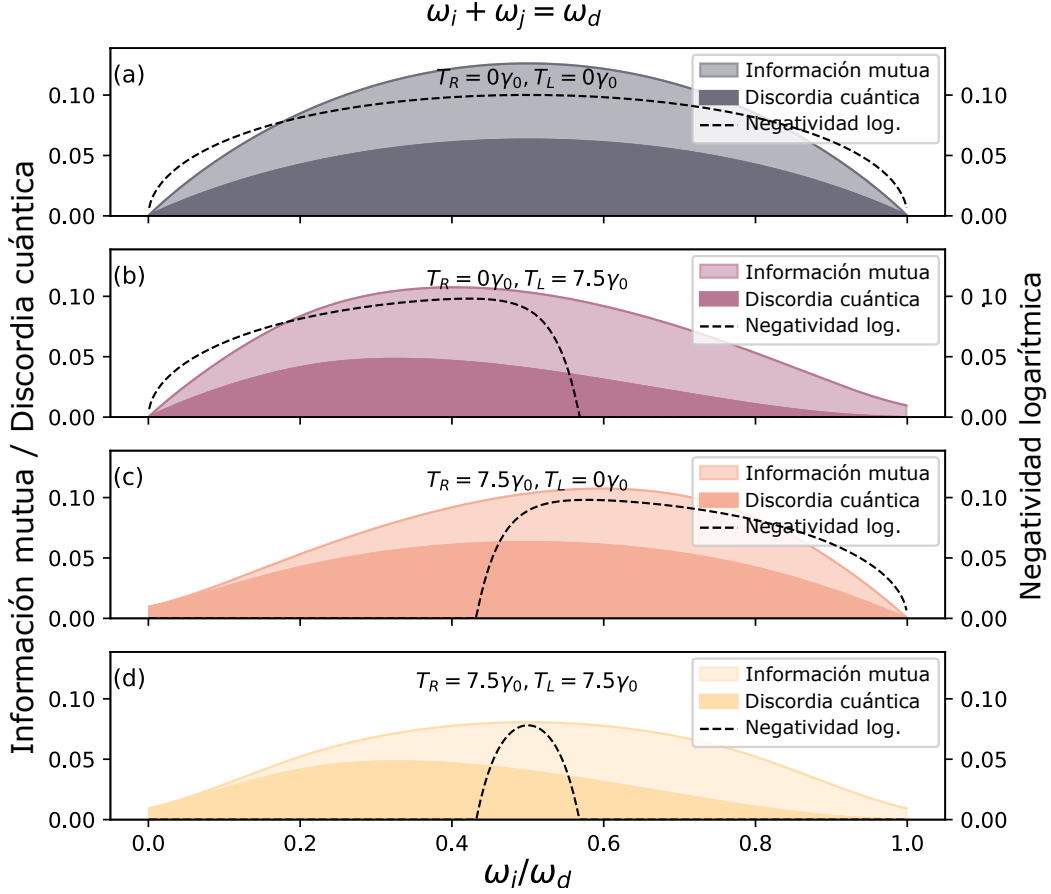


Figura 4.3: Dependencia de la información mutua, la discordia cuántica y la negatividad logarítmica con la frecuencia ω_i para el caso no resonante, con $\omega_i + \omega_j = \omega_d$. (a) Cuando ambos reservorios se encuentran a temperatura cero, el entrelazamiento se maximiza y $\overline{D}_+/I_+ \rightarrow 1/2$. (b,c) La temperatura es elevada en uno de los reservorios hasta $T = 7,5\gamma_0$, mientras que la otra se mantiene constante a $T = 0$. Ésto ilustra la asimetría de la discordia cuántica. (d) Ambas temperaturas son elevadas hasta $T = 7,5\gamma_0$ y el único entrelazamiento restante es que el se encuentra entre las bandas centrales. El potencial externo y la densidad espectral son, respectivamente, $V(t) = \omega_r^2 + V\cos(\omega_d t)$ e $I(\omega) = 2M\gamma_0\omega\Lambda^2/\pi(\omega^2 + \Lambda^2)$. Los gráficos fueron normalizados utilizando $E_0 = \gamma_0\Delta\omega Vt/\omega_r^3$ (graficamos I_-/E_0^2 , \overline{D}_-/E_0^2 y E_N/E_0). Los parámetros usados son $\omega_d = \omega_r/\sqrt{11}$, $\omega_r = 800\gamma_0$, $V = \omega_r^2/32$, $m = 10m_i$, $t = 20\gamma_0$ y $\gamma_0 = 0,005$.

$\mu_{i,j} \rightarrow 1$, en cuyo caso $\Gamma_N \rightarrow \sqrt{\Gamma_+}$. Por el otro, proveen un umbral S_{ij} que el mecanismo de creación de pares de excitaciones tiene que superar para entrelazar las bandas, pues se necesita $E_N > 0$, que implica que $\Gamma_N \times t > S_{ij}$. La negatividad logarítmica está graficada junto a la información mutua y la discordia cuántica en las Figs. 4.3 (a)-(d) para distintas temperaturas. A medida que la temperatura aumenta, el entrelazamiento desaparece del lado que corresponde a las frecuencias bajas del reservorio a alta temperatura.

Es interesante notar que S_{ij} es obtenido a partir de la entropía de Shannon de la densidad de cuasiprobabilidad de Wigner del espacio de fases correspondiente a $\rho_{\alpha_{av}}$ y $\rho_{\beta_{av}}$, por lo que puede ser interpretado como una medida del desorden tanto absoluto como relativo

presente en las bandas. Podemos escribirlo como

$$S_{ij} = \bar{S}_2 + \frac{1}{2} \ln[\cosh(\Delta S_2)], \quad (4.61)$$

donde

$$\bar{S}_2 = \frac{1}{2} [S_2(\rho_{\alpha_{av}}) + S_2(\rho_{\beta_{av}})] \quad (4.62)$$

y

$$\Delta S_2 = \frac{1}{2} [S_2(\rho_{\alpha_{av}}) - S_2(\rho_{\beta_{av}})], \quad (4.63)$$

con $S_2(\rho) = -\ln[\text{tr}(\rho^2)]$ la entropía de Renyi-2 que, para estados Gaussianos, coincide con la entropía de Shannon de la densidad de cuasiprobabilidad de Wigner del espacio de fases correspondiente a ρ , a menos de una constante aditiva [58]. Como muestra la Ec. (4.61), no solo la entropía media \bar{S}_2 afecta la producción de entrelazamiento entre las bandas, sino que la diferencia ΔS_2 también lo hace. Por ejemplo, debido a que a altas temperaturas $S_2 \sim \ln(T)$, es más difícil entrelazar dos bandas a diferentes temperaturas que dos bandas que se encuentren a temperaturas similares. Además, S_{ij} fija una latencia $t_{\text{ent}} = S_{ij}/\Gamma_N$, que es el tiempo que es necesario esperar hasta que las bandas se entrelacen.

Como mencionamos previamente, $\Gamma_{\pm}(t)$ puede ser interpretado como el responsable de generar las correlaciones. En vista de los resultados anteriores, para las bandas correlacionadas mediante la creación no resonante de pares de excitación podemos escribir a este objeto como

$$|\Gamma_+(t)| = \frac{|\Gamma_+|}{\Gamma_N^2} [E_N(t) + S_{ij}]^2 \quad (4.64)$$

para $t > t_{\text{ent}}$. La Ec. (4.64) muestra que, desde el momento en que las bandas se entrelazan, podemos interpretar que el mecanismo de creación de pares de excitaciones tiene el doble efecto de incrementar dicho entrelazamiento y, además, generar un aumento de entropía en los reservorios (o *desordenarlos*). Es necesario enfatizar que, como las purezas individuales no varían significativamente en el tiempo, S_{ij} es aproximadamente constante y entonces el efecto predominante es la producción de entrelazamiento. Como consecuencia de la Ec. (4.64), tanto la información mutua como la discordia cuántica pueden ser escritas en términos de la negatividad logarítmica y, para cada E_N fijo, encontramos que ambas son funciones no monotónicas de las purezas individuales, en concordancia con resultados previos [72]. Además, queremos notar que Γ_N , que representa la generación de entrelazamiento, es proporcional al número de pares entrelazados $\Delta\omega$, como debería serlo pues la negatividad logarítmica es una cantidad aditiva. Esto es en contraposición a la información mutua y a la discordia cuántica, que son proporcionales a $\Delta\omega^2$ y no aditivas.

Antes de finalizar queremos hacer un comentario más sobre los procesos resonantes. Como mencionamos al comienzo de la sección, las bandas que cumplen $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$ no están entrelazadas. Es decir, el transporte de excitaciones de una banda a otra no genera entrelazamiento. Sin embargo, puede ser que este transporte juegue un rol en el entrelazamiento presente en las bandas correlacionadas por la creación no resonante de pares de excitaciones (las que cumplen $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$). Supongamos que la excitación presente en la banda i que luego absorberá un paquete de energía del potencial externo para ser transportada a la banda j (recordar que $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$) fue depositada allí por el mecanismo de creación de pares. En tal caso, debe existir una banda j' que cumpla $\omega_i + \omega_{j'} = k'\omega_d$. Consecuentemente, las bandas j y j' estarían relacionadas mediante $\omega_j + \omega_{j'} = (k + k')\omega_d$ lo que

significa que, en efecto, estarían también entrelazadas. De este análisis concluimos que, si bien los procesos resonantes no producen entrelazamiento, sí serían capaces de intercambiar el entrelazamiento creado por los procesos no resonantes a otras bandas. Este efecto debería ser de un orden mayor en γ_0 y por eso no es observado en las ecuaciones presentadas anteriormente.

Capítulo 5

Resumen y conclusiones

En este trabajo presentamos una teoría general para la clase de motores cuánticos lineales, estudiando la dinámica de su funcionamiento y la generación de correlaciones en los reservorios. Estos motores están compuestos por una sustancia motora formada por una red arbitraria de osciladores sometidos a un potencial externo periódico y acoplada a reservorios bosónicos que pueden ser térmicos o no térmicos. Si bien dichos acoplamientos son estáticos, el potencial externo le permite al motor realizar cualquier tipo de ciclo termodinámico que se desee, incluidos ciclos fuera de equilibrio termodinámico.

Comenzamos mostrando la forma que toma la primera ley de la termodinámica para este tipo de máquinas, relacionando así el trabajo promedio que se puede extraer del motor durante un período del ciclo termodinámico con el calor promedio que entra o sale de cada uno de los reservorios durante ese mismo tiempo. Un análisis minucioso reveló que hay solo dos procesos encargados de intercambiar calor entre los reservorios y la sustancia motora: los procesos resonantes y los no resonantes. Los procesos resonantes transportan excitaciones de un modo de algún reservorio hacia otro modo, a través de la sustancia motora, absorbiendo o emitiendo paquetes de energía desde o hacia el potencial externo. Estos procesos son análogos al transporte de calor clásico, donde ahora la dirección en la que éste fluye depende de la diferencia entre los números de ocupación de los modos del reservorio entre los cuales la excitación está siendo transportada, y además dictaminan si es posible o no extraer trabajo de la máquina. Por otro lado, los procesos no resonantes dividen un paquete de energía del potencial externo y crean un par de excitaciones en dos modos de los reservorios. Éstos constanamente depositan energía en ellos, y dominan la transferencia de calor a bajos números de ocupación. En el caso de reservorios térmicos, uno diría que los procesos no resonantes constantemente calientan a los reservorios, incluso a temperatura igual a cero. Por ello, son asociados con el postulado de Nerst de la tercera ley de la termodinámica. Luego pasamos a estudiar la segunda ley de la termodinámica. Analizamos la generalización del enunciado de Kelvin-Planck, mostrando que si la sustancia motora está acoplada a un solo reservorio entonces no se puede extraer trabajo a menos que haya inversión de población. Además, como consecuencia de la producción irreversible de entropía (que es una característica proveniente de la subaditividad de la entropía de von Neumann y no es exclusiva del sistema con el que estamos trabajando), demostramos una desigualdad de Clausius generalizada. Ésta por un lado impide que la energía que se pierde en forma de calor sin ser convertida en trabajo útil sea arbitrariamente pequeña y, por el otro, muestra que la eficiencia de los motores cuánticos lineales satisface una cota generalizada al estilo

de la de Carnot, que coincide con ésta cuando los reservorios son térmicos y puede ser mayor cuando no lo son. Utilizando los resultados previos, pudimos estimar el costo energético de transformar reservorios térmicos en no térmicos, que permiten al motor alcanzar altas eficiencias aprovechando esos nuevos recursos. Mostramos que este costo puede ser menor que la energía necesaria para hacer funcionar el motor durante un ciclo, incluso si la eficiencia es arbitrariamente cercana a uno, y proporcionamos una cota inferior en términos de la cantidad de trabajo que se desea extraer y la eficiencia que se desea alcanzar. En particular, analizamos el caso de reservorios térmicos *squeezados*. Finalmente, discutimos sobre los aspectos clásicos y cuánticos de este motor, y mostramos que si bien los efectos puramente cuánticos sin duda influyen en el funcionamiento del motor, haciendo variar su eficiencia entre un ciclo y otro, en promedio éstos no son ni beneficiosos ni perjudiciales para éste.

En la segunda parte del trabajo presentamos un análisis completo de las correlaciones clásicas y cuánticas que se generan dentro de los reservorios a tiempos largos. Para ello dividimos a cada reservorio en secciones finitas que llamamos bandas, y mostramos que sólo los procesos resonantes y no resonantes generan correlaciones entre ellas más allá del régimen transitorio. Es decir, sólo las bandas cuyas frecuencias centrales cumplen $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$ o $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$ están correlacionadas a tiempos largos. Para cuantificar dichas correlaciones utilizamos tres medidas estándares en información cuántica: la información mutua, que mide las correlaciones totales, la discordia cuántica, que mide las correlaciones cuánticas, y la negatividad logarítmica, que mide el entrelazamiento. Los resultados más importantes que obtuvimos son:

- Existe un régimen donde la información mutua y la discordia cuántica entre las bandas crece de forma aproximadamente cuadrática en el tiempo. Esto sucede siempre y cuando las perezas individuales se mantengan aproximadamente constantes. En el caso resonante ambas cantidades están acotadas superiormente, lo que muestra que este régimen eventualmente debe terminar.
- Independientemente del proceso que las correlacione, las bandas siempre presentan discordia cuántica no nula entre ellas. La fracción de correlaciones cuánticas respecto de las totales se ve negativamente afectada por las agitaciones térmicas del entorno. Este efecto es peor en las bandas correlacionadas por los procesos no resonantes que en las bandas correlacionadas por los procesos resonantes, indicando que las correlaciones producidas por éste último son más robustas.
- Solo están entrelazadas las bandas correlacionadas mediante los procesos no resonantes. Mostramos que la negatividad logarítmica crece aproximadamente lineal en el tiempo, y que el mecanismo de creación de pares tiene que superar un umbral para poder correlacionar las bandas que puede ser interpretado como una medida del desorden (absoluto y relativo) de éstas.
- Los procesos resonantes no pueden crear entrelazamiento, pero sí pueden intercambiarlo. Debido a que transportan excitaciones de una banda hacia otra, si la banda de la cual la excitación fue absorbida ya estaba entrelazada con alguna otra banda, el proceso puede intercambiar este entrelazamiento con la banda en la cual la excitación es depositada. Este es un efecto de orden mayor al que analizamos, y por ello no se ve explícitamente en las ecuaciones obtenidas.

Los resultados obtenidos en este trabajo son consistentes con estudios previos de sistemas similares y, además, generalizan a éstos. Queremos hacer énfasis en que nuestros resultados están restringidos a la clase de motores cuánticos lineales y, en principio, no deberían ser extendidos a sistemas arbitrarios sin cuidado. Sin embargo, por la naturaleza abarcativa de la termodinámica, uno estaría tentado a suponer que algunos de ellos, como por ejemplo la desigualdad generalizada de Clausius o la cota generalizada para la eficiencia, seguirían siendo válidos más allá del régimen lineal. Esperamos que este trabajo sea el puntapié inicial para llegar a obtener una teoría generalizada para cualquier tipo de motor cuántico.

Apéndice A

Calor intercambiado por cada reservorio

En este apéndice vamos a realizar el cálculo explícito de $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$, que es el calor intercambiado por el reservorio \mathcal{E}_α durante un ciclo termodiámico a tiempos largos. Luego, vamos a escribirlo como suma de procesos elementales, demostrando así la Ec. (3.19), y por último veremos propiedades de las tasas de transición y emisión.

Recordamos que la definición de $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$ era

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt \dot{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}(t), \quad (\text{A.1})$$

con $\dot{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} = d\langle H_{\mathcal{E}_\alpha} \rangle / dt$, por lo que deberíamos comenzar calculando $\langle H_{\mathcal{E}_\alpha} \rangle$. Sin embargo, podemos tomar un atajo que nos va a ahorrar cuentas. Para ello, notamos que

$$\dot{Q}_S + \dot{Q}_\mathcal{E} = -\frac{d}{dt} \langle H_{S\mathcal{E}} \rangle \quad (\text{A.2})$$

y, por lo que vimos en la **Sección 3.2.2**,

$$\bar{Q}_S + \bar{Q}_\mathcal{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \bar{Q}_S = -\bar{Q}_\mathcal{E} = -\sum_\alpha \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}. \quad (\text{A.3})$$

Vemos que, si bien el término $H_{S\mathcal{E}}$ no conserva la energía instante a instante (es decir, $[H_S + H_\mathcal{E}, H_{S\mathcal{E}}] \neq 0$), durante un ciclo completo actúa como si lo hiciera. Entonces, en vez de calcular $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$, vamos a calcular \bar{Q}_S y luego identificar las contribuciones individuales de cada reservorio. Queremos hacer énfasis en que éste no es un paso trivial y el motivo por el cual lo vamos a poder hacer es porque ya conocemos el resultado al haber previamente calculado $\langle H_{\mathcal{E}_\alpha} \rangle$ [41]. Por un lado tenemos la ecuación de Heisenberg para $\langle H_S \rangle$,

$$\frac{d}{dt} \langle H_S \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [H_S, H_{S\mathcal{E}}] \rangle + \langle \partial_t H_S \rangle \quad (\text{A.4})$$

que nos indica que $\dot{Q}_S = \langle [H_S, H_{S\mathcal{E}}] \rangle / i\hbar$ y, por el otro, podemos calcular la derivada de $\langle H_S \rangle$ explícitamente como

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle H_S \rangle = & \\ & \frac{1}{4} \text{tr} \left[M^{-1} \frac{d}{dt} \langle \{P, P\} \rangle \right] + \frac{1}{4} \text{tr} \left[V(t) \frac{d}{dt} \langle \{X, X\} \rangle \right] + \frac{1}{4} \text{tr} \left[\frac{d}{dt} V(t) \langle \{X, X\} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Comparando las Ecs. (A.4) y (A.5), identificamos

$$\dot{Q}_S = \frac{1}{4} \text{tr} \left[M^{-1} \frac{d}{dt} \langle \{P, P\} \rangle \right] + \frac{1}{4} \text{tr} \left[V(t) \frac{d}{dt} \langle \{X, X\} \rangle \right]. \quad (\text{A.6})$$

Luego,

$$\bar{Q}_S = \frac{1}{4} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt \text{tr} \left[M^{-1} \frac{d}{dt} \langle \{P, P\} \rangle \right] + \frac{1}{4} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt \text{tr} \left[V(t) \frac{d}{dt} \langle \{X, X\} \rangle \right] \quad (\text{A.7})$$

El primer sumando del lado derecho de la Ec. (A.7) se anula porque, como vimos en la **Sección 2.5**, $\langle \{P, P\} \rangle$ es una función τ_d periódica a tiempos largos. Además, $d\langle \{X, X\} \rangle / dt = 2\langle \{X, P\} \rangle M^{-1}$. Entonces, solo resta calcular

$$\bar{Q}_S = \frac{1}{2} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt \text{tr} [V(t) \langle \{X, P\} \rangle M^{-1}]. \quad (\text{A.8})$$

Como solo interesa el valor del integrando a tiempos largos, para simplificar la cuenta podemos reemplazar $\langle \{X, P\} \rangle$ por lo calculado en la **Sección 2.5**,

$$\begin{aligned} \langle \{X(t), P(t)\} \rangle &\longrightarrow \\ \hbar \sum_{\alpha} \sum_{n, m} \text{Im} \left\{ e^{i(n-m)\omega_d t} \int_0^{\infty} d\omega (\omega + m\omega_d) \tilde{A}_n(i\omega) I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_m^{\dagger}(i\omega) f_{\alpha}(\omega) M \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

donde solo escribimos uno de los dos términos sin el 1/2 adelante pues estamos calculando la traza y ambos terminos contribuyen por igual, y así llegar a

$$\begin{aligned} \bar{Q}_S &= \frac{1}{2} \hbar \sum_{\alpha} \sum_{k, l} \text{Im} \left\{ \text{tr} \left[\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt V(t) e^{i(k-l)\omega_d t} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \int_0^{\infty} d\omega (\omega + l\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_l^{\dagger}(i\omega) f_{\alpha}(\omega) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Antes de continuar queremos remarcar que, si bien estamos haciendo uso de lo calculado en la **Sección 2.5**, esto no significa que ahora estemos suponiendo algo sobre el estado inicial global, como hicimos en ese momento. El cálculo de los elementos de la matriz de covarianza de S realizado en la **Sección 2.5** es totalmente general. La hipótesis de estado inicial Gaussiano nos permitió describir al estado solo mediante su matriz de covarianza. Acá solo estamos haciendo uso de las expresiones de los elementos de dicha matriz, y no describiendo al estado. Para resolver la integral temporal en la Ec. (A.10) descomponemos el potencial externo $V(t)$ en su serie de Fourier,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt V(t) e^{i(k-l)\omega_d t} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_m V_m \int_{n\tau_d}^{(n+1)\tau_d} dt e^{i(m+k-l)\omega_d t} \\ &= \tau_d \sum_m V_m \delta_{m, l-k} \\ &= \tau_d V_{l-k}, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

y reemplazamos lo obtenido en la Ec. (A.10):

$$\bar{Q}_S = \frac{1}{2} \hbar \tau_d \sum_{\alpha} \sum_{k, l} \text{Im} \left\{ \int_0^{\infty} d\omega (\omega + l\omega_d) \text{tr} [V_{l-k} \tilde{A}_k(i\omega) I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_l^{\dagger}(i\omega)] f_{\alpha}(\omega) \right\}. \quad (\text{A.12})$$

Ahora vamos a mostrar que

$$\mathcal{A} \doteq \sum_{k,l} \text{Im} \left\{ \omega \text{tr}[V_{l-k} \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_l^\dagger(i\omega)] \right\} = 0. \quad (\text{A.13})$$

Esto lo hacemos escribiendo explícitamente la parte imaginaria como la resta del término correspondiente y su conjugado, usando que $V_{l-k}^* = V_{k-l}$ y propiedades de la traza de matrices:

$$\begin{aligned} 2i\mathcal{A} &= \sum_{k,l} \omega \text{tr}[V_{l-k} \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_l^\dagger(i\omega)] - \sum_{k,l} \omega \text{tr}[V_{l-k} \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_l^\dagger(i\omega)]^* \\ &= \sum_{k,l} \omega \text{tr}[V_{l-k} \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_l^\dagger(i\omega)] - \sum_{k,l} \omega \text{tr}[V_{l-k}^* \tilde{A}_k^*(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_l^T(i\omega)] \\ &= \sum_{k,l} \omega \text{tr}[V_{l-k} \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_l^\dagger(i\omega)] - \sum_{k,l} \omega \text{tr}[\tilde{A}_l(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega) V_{k-l}] \\ &= \sum_{k,l} \omega \text{tr}[V_{l-k} \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_l^\dagger(i\omega)] - \sum_{k,l} \omega \text{tr}[V_{k-l} \tilde{A}_l(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Por lo tanto, la Ec. (A.12) se simplifica a

$$\bar{Q}_S = \frac{1}{2} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_{k,l} \text{Im} \left\{ \int_0^\infty d\omega k \omega_d \text{tr}[V_l \tilde{A}_{k-l}(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] f_\alpha(\omega) \right\}, \quad (\text{A.15})$$

donde renombramos y redefinimos los índices de la sumatoria. Ahora vamos a hacer uso de la ecuación que define a los coeficientes \tilde{A}_k , la Ec. (2.27), para escribir

$$\begin{aligned} \sum_l V_l \tilde{A}_{k-l}(i\omega) &= V_0 \tilde{A}_k(i\omega) + \sum_{l \neq 0} V_l \tilde{A}_{k-l}(i\omega) \\ &= V_0 \tilde{A}_k(i\omega) + \mathbb{1}_{N_S} \delta_{k,0} - \tilde{g}^{-1}[i(\omega + k\omega_d)] \tilde{A}_k(i\omega) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

y reemplazar el resultado en la Ec. (A.15):

$$\begin{aligned} \bar{Q}_S &= \frac{1}{2} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \text{Im} \left\{ \int_0^\infty d\omega k \omega_d \text{tr}[V_0 \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] f_\alpha(\omega) \right\} \\ &\quad - \frac{1}{2} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \text{Im} \left\{ \int_0^\infty d\omega k \omega_d \text{tr}[\tilde{g}^{-1}[i(\omega + k\omega_d)] \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] f_\alpha(\omega) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

El primer sumando de la Ec. (A.17) se anula pues $\text{tr}[V_0 \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)]$ es un número real:

$$\begin{aligned} \text{tr}[V_0 \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)]^* &= \text{tr}[V_0^* \tilde{A}_k^*(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^T(i\omega)] \\ &= \text{tr}[V_0 \tilde{A}_k^*(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^T(i\omega)] \\ &= \text{tr}[\tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega) V_0] \\ &= \text{tr}[V_0 \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)]. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Entonces, el calor intercambiado nos queda

$$\bar{Q}_S = -\frac{1}{2} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \int_0^\infty d\omega k \omega_d \text{tr}[\text{Im}\{\tilde{g}^{-1}[i(\omega + k\omega_d)]\} \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] f_\alpha(\omega). \quad (\text{A.19})$$

Ahora utilizamos la identidad que demostramos en la **Sección 2.3.3**, que es válida si extendemos la definición de la densidad espectral a frecuencias negativas como una función impar (es decir, $I(-\omega) \doteq -I(\omega)$),

$$\text{Im}[\tilde{g}^{-1}(i\omega)] = \frac{\pi}{2} I(\omega), \quad (\text{A.20})$$

para llegar a la expresión final de \bar{Q}_S :

$$\bar{Q}_S = -\frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\alpha} \sum_k \int_0^{\infty} d\omega k \omega_d \text{tr}[I(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_k^{\dagger}(i\omega)] f_{\alpha}(\omega). \quad (\text{A.21})$$

Al momento de identificar el calor intercambiado por cada reservorio \mathcal{E}_{α} , debido a que $\bar{Q}_S = -\bar{Q}_{\mathcal{E}} = -\sum_{\alpha} \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}$, uno estaría tentado a mirar la Ec. (A.21) y suponer

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}} = \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_k \int_0^{\infty} d\omega k \omega_d \text{tr}[I(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_k^{\dagger}(i\omega)] f_{\alpha}(\omega), \quad (\text{A.22})$$

pero esto no es necesariamente cierto. De hecho, para identificar cada $\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}$, tenemos que seguir una serie de pasos no triviales que, como aclaramos antes, podemos hacerlo porque ya los calculamos por otro camino y conocemos el resultado. El primero de estos pasos es tomar la Ec. (A.21) y sumar y restar ω al integrando:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\mathcal{E}} &= \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\alpha} \sum_k \int_0^{\infty} d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_k^{\dagger}(i\omega)] f_{\alpha}(\omega) \\ &\quad - \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\alpha} \sum_k \int_0^{\infty} d\omega \omega \text{tr}[I(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_k^{\dagger}(i\omega)] f_{\alpha}(\omega). \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

El paso siguiente es hacer un cambio de variables en la primera integral de la Ec. (A.23) y separar los intervalos de integración:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\mathcal{E}} &= \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\alpha} \sum_k \int_0^{\infty} d\omega \omega \text{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_{\alpha}(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^{\dagger}[i(\omega - k\omega_d)]] f_{\alpha}(\omega - k\omega_d) \\ &\quad + \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\alpha} \sum_k \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \text{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_{\alpha}(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^{\dagger}[i(\omega - k\omega_d)]] f_{\alpha}(\omega - k\omega_d) \\ &\quad - \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\alpha} \sum_k \int_0^{\infty} d\omega \omega \text{tr}[I(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_k^{\dagger}(i\omega)] f_{\alpha}(\omega). \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Ahora veamos que la segunda integral de la Ec. (A.24) es igual a cero. Para ello vamos a dividir la suma en los k positivos y negativos, usar la propiedad de conjugación de los \tilde{A}_k (ver la **Sección 2.3.1**), y extender la definición de f_{α} a frecuencias negativas como una función

impar (es decir, $f_\alpha(-\omega) \doteq -f_\alpha(\omega)$):

$$\begin{aligned}
& \sum_k \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&= \sum_{k>0} \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&+ \sum_{k<0} \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&= \sum_{k>0} \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&+ \sum_{k>0} \int_{k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)] I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]] f_\alpha(\omega + k\omega_d) \quad (\text{A.25}) \\
&= \sum_{k>0} \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&- \sum_{k>0} \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k^*[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^T[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&= \sum_{k>0} \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&- \sum_{k>0} \int_{-k\omega_d}^0 d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Entonces, la Ec. (A.24) nos queda

$$\begin{aligned}
\bar{Q}_\varepsilon &= \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&- \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] f_\alpha(\omega). \quad (\text{A.26})
\end{aligned}$$

En la segunda integral de la Ec. (A.26) usamos que $\tilde{A}_k(i\omega) = \tilde{A}_{-k}^T[i(\omega + k\omega_d)]$, como demostramos en la **Sección 2.3.2**, y hacemos el cambio de índice $k \rightarrow -k$:

$$\begin{aligned}
\bar{Q}_\varepsilon &= \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&- \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^T[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k^*[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega) \\
&= \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{tr}[I(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\alpha(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega - k\omega_d) \\
&- \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_\alpha \sum_k \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega). \quad (\text{A.27})
\end{aligned}$$

Para llegar a la expresión final, desarmamos las densidades espectrales I en la Ec. (A.27) como la suma de las densidades espectrales individuales I_β e intercambiamos los índices

$\alpha \leftrightarrow \beta$:

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}} = \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\alpha, \beta} \sum_k \int_0^{\infty} d\omega \omega \times \text{tr}[I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_{\beta}(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^{\dagger}[i(\omega - k\omega_d)]] [f_{\beta}(\omega - k\omega_d) - f_{\alpha}(\omega)]. \quad (\text{A.28})$$

Por lo tanto, ahora si podemos identificar a los calores intercambiados entre cada reservorio y la sustancia motora tomando el sumando α de la ecuación anterior:

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}} = \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_k \int_0^{\infty} d\omega \omega \times \text{tr}[I_{\alpha}(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_{\beta}(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^{\dagger}[i(\omega - k\omega_d)]] [f_{\beta}(\omega - k\omega_d) - f_{\alpha}(\omega)]. \quad (\text{A.29})$$

A.1 Descomposición en procesos elementales

En esta sección vamos a demostrar la Ec. (3.19). Es decir, que la Ec. (A.29) se puede escribir como suma de tres contribuciones de procesos elementales,

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}} = \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{ST} + \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^R + \bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{NR}, \quad (\text{A.30})$$

donde cada una de ellas está dada por

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_{\alpha}}^{ST} \doteq \tau_d \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar \omega p_{\alpha, \beta}^{(0)}(\omega) [n_{\beta}^0(\omega) - n_{\alpha}^0(\omega)], \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\alpha}^R &= \tau_d \sum_{k>0, \beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar(\omega + k\omega_d) p_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) n_{\beta}^0(\omega) \\ &\quad - \tau_d \sum_{k>0, \beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar(\omega + k\omega_d) p_{\beta, \alpha}^{(-k)}(\omega + k\omega_d) n_{\alpha}^0(\omega + k\omega_d) \\ &\quad + \tau_d \sum_{k>0, \beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar \omega p_{\alpha, \beta}^{(-k)}(\omega + k\omega_d) n_{\beta}^0(\omega + k\omega_d) \\ &\quad - \tau_d \sum_{k>0, \beta} \int_0^{\infty} d\omega \hbar \omega p_{\beta, \alpha}^{(k)}(\omega) n_{\alpha}^0(\omega), \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

y

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{\alpha}^{NR} &= \tau_d \sum_{k>0, \beta} \int_0^{k\omega_d} d\omega \hbar(k\omega_d - \omega) \tilde{p}_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) [n_{\beta}^0(\omega) + 1/2] \\ &\quad + \tau_d \sum_{k>0, \beta} \int_0^{k\omega_d} d\omega \hbar \omega \tilde{p}_{\beta, \alpha}^{(k)}(\omega) [n_{\alpha}^0(\omega) + 1/2], \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

junto con las tasas

$$p_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) = (\pi/2) \text{tr}[I_{\alpha}(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_{\beta}(\omega) \tilde{A}_k^{\dagger}(i\omega)] \quad (\text{A.34})$$

y

$$\tilde{p}_{\alpha, \beta}^{(k)}(\omega) = (\pi/2) \text{tr}[I_{\alpha}(k\omega_d - \omega) \tilde{A}_{-k}(i\omega) I_{\beta}(\omega) \tilde{A}_{-k}^{\dagger}(i\omega)]. \quad (\text{A.35})$$

El primer paso es tomar la Ec. (A.29) y dividir la sumatoria sobre k en los positivos, negativos y el término nulo:

$$\begin{aligned}
\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} &= \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_0(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_0^\dagger(i\omega)] [f_\beta(\omega) - f_\alpha(\omega)] \\
&+ \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] \\
&\times [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&+ \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k<0} \int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] \\
&\times [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)]
\end{aligned} \tag{A.36}$$

El primer término del lado derecho de la Ec. (A.36), el correspondiente a $k = 0$, es el que da origen a $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST}$. Sólo hay que reemplazar $f_\alpha(\omega) = 2n_\alpha^0(\omega) + 1$ y $(\pi/2) \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_0(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_0^\dagger(i\omega)] = p_{\alpha,\beta}^{(0)}(\omega)$ para llegar al resultado mostrado en la Ec. (3.20). Entonces, escribimos

$$\begin{aligned}
\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} &= \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST} \\
&+ \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] \\
&\times [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&+ \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k<0} \int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] \\
&\times [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)]
\end{aligned} \tag{A.37}$$

Ahora tomamos el segundo término del lado derecho de la Ec. (A.37), dividimos la integral en dos partes, de 0 a $k\omega_d$ y de $k\omega_d$ a ∞ , y en la segunda parte hacemos el cambio de variables $\omega \rightarrow \omega + k\omega_d$:

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&= \int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&+ \int_0^{\infty} d\omega (\omega + k\omega_d) \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] [f_\beta(\omega) - f_\alpha(\omega + k\omega_d)].
\end{aligned} \tag{A.38}$$

Además, en el tercer término del lado derecho de la Ec. (A.37) cambiamos el signo de los k :

$$\begin{aligned}
&\sum_{k<0} \int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&= \sum_{k>0} \int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)] I_\beta(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]] [f_\beta(\omega + k\omega_d) - f_\alpha(\omega)].
\end{aligned} \tag{A.39}$$

Introduciendo estos cambios en la Ec. (A.37) llegamos a

$$\begin{aligned}
\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} &= \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST} \\
&+ \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] \\
&\times [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&+ \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] [f_\beta(\omega) - f_\alpha(\omega + k\omega_d)] \\
&+ \frac{\pi}{4} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)] I_\beta(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]] \\
&\times [f_\beta(\omega + k\omega_d) - f_\alpha(\omega)].
\end{aligned} \tag{A.40}$$

La contribución de los procesos no resonantes viene del segundo término de lado derecho de la Ec. (A.40). Para llegar a ella vamos a tomarlo, separar la resta de las funciones f_α y f_β , y extender las definiciones de I_α y f_α a frecuencias negativas como funciones impares:

$$\begin{aligned}
&\int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&= \int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(k\omega_d - \omega) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\beta(k\omega_d - \omega) \\
&+ \int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(k\omega_d - \omega) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] f_\alpha(\omega).
\end{aligned} \tag{A.41}$$

Ahora hacemos el cambio de variables $k\omega_d - \omega \rightarrow \omega$ en el primer término de la derecha de la Ec. (A.41), y en el segundo término usamos la propiedad de traslación del argumento de los \tilde{A}_k , $\tilde{A}_k(i\omega) = \tilde{A}_{-k}^T[i(\omega + k\omega_d)]$, que demostramos en la **Sección 2.3.2**:

$$\begin{aligned}
&\int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&= \int_0^{k\omega_d} d\omega (k\omega_d - \omega) \operatorname{tr}[I_\alpha(k\omega_d - \omega) \tilde{A}_k(-i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(-i\omega)] f_\beta(\omega) \\
&+ \int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_{-k}^T(i\omega) I_\beta(k\omega_d - \omega) \tilde{A}_{-k}^*(i\omega)] f_\alpha(\omega).
\end{aligned} \tag{A.42}$$

Por último, en el primer término de la derecha de la Ec. (A.42) usamos la propiedad de conjugación de los \tilde{A}_k , $\tilde{A}_k(-i\omega) = \tilde{A}_{-k}^*(i\omega)$, que demostramos en la **Sección 2.3.1**, y en ambos términos usamos que la traza de una matriz es igual a la traza de su traspuesta:

$$\begin{aligned}
&\int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_k[i(\omega - k\omega_d)] I_\beta(\omega - k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger[i(\omega - k\omega_d)]] [f_\beta(\omega - k\omega_d) - f_\alpha(\omega)] \\
&= \int_0^{k\omega_d} d\omega (k\omega_d - \omega) \operatorname{tr}[I_\alpha(k\omega_d - \omega) \tilde{A}_{-k}(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_{-k}^\dagger(i\omega)] f_\beta(\omega) \\
&+ \int_0^{k\omega_d} d\omega \omega \operatorname{tr}[I_\beta(k\omega_d - \omega) \tilde{A}_{-k}(i\omega) I_\alpha(\omega) \tilde{A}_{-k}^\dagger(i\omega)] f_\alpha(\omega).
\end{aligned} \tag{A.43}$$

Sólo resta reemplazar $f_\alpha(\omega) = 2n_\alpha^0(\omega) + 1$ y $(\pi/2)\text{tr}[I_\alpha(k\omega_d - \omega)\tilde{A}_{-k}(i\omega)I_\beta(\omega)\tilde{A}_{-k}^\dagger(i\omega)] = \tilde{p}_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega)$ para llegar al resultado mostrado en la Ec. (3.27). Entonces, la Ec. (A.40) la escribimos de la forma

$$\begin{aligned}\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} &= \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST} + \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{NR} \\ &+ \frac{\pi}{4}\hbar\tau_d \sum_\beta \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_k(i\omega)I_\beta(\omega)\tilde{A}_k^\dagger(i\omega)][f_\beta(\omega) - f_\alpha(\omega + k\omega_d)] \\ &+ \frac{\pi}{4}\hbar\tau_d \sum_\beta \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega \omega \text{tr}[I_\alpha(\omega)\tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)]I_\beta(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]] \\ &\times [f_\beta(\omega + k\omega_d) - f_\alpha(\omega)].\end{aligned}\tag{A.44}$$

Resta escribir los dos últimos términos de la Ec. (A.44) como la contribución de los procesos resonantes. Para ello primero escribimos todas las f_α en términos del número de ocupación, y desarmamos las restas entre ellos:

$$\begin{aligned}\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} &= \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST} + \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{NR} \\ &+ \frac{\pi}{2}\hbar\tau_d \sum_\beta \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_k(i\omega)I_\beta(\omega)\tilde{A}_k^\dagger(i\omega)]n_\beta(\omega)^0 \\ &- \frac{\pi}{2}\hbar\tau_d \sum_\beta \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_k(i\omega)I_\beta(\omega)\tilde{A}_k^\dagger(i\omega)]n_\alpha^0(\omega + k\omega_d) \\ &+ \frac{\pi}{2}\hbar\tau_d \sum_\beta \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega \omega \text{tr}[I_\alpha(\omega)\tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)]I_\beta(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]]n_\beta^0(\omega + k\omega_d) \\ &- \frac{\pi}{2}\hbar\tau_d \sum_\beta \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega \omega \text{tr}[I_\alpha(\omega)\tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)]I_\beta(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]]n_\alpha^0(\omega).\end{aligned}\tag{A.45}$$

En el cuarto y sexto sumando de la Ec. (A.45) usamos la propiedad de traslación de los \tilde{A}_k y que la traza de una matriz es igual a la traza de su traspuesta:

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_k(i\omega)I_\beta(\omega)\tilde{A}_k^\dagger(i\omega)]n_\alpha^0(\omega + k\omega_d) \\ &= \int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_{-k}^T[i(\omega + k\omega_d)]I_\beta(\omega)\tilde{A}_{-k}^*[i(\omega + k\omega_d)]]n_\alpha^0(\omega + k\omega_d) \\ &= \int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I_\beta(\omega)\tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)]I_\alpha(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]]n_\alpha^0(\omega + k\omega_d)\end{aligned}\tag{A.46}$$

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty d\omega \omega \text{tr}[I_\alpha(\omega)\tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)]I_\beta(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]]n_\alpha^0(\omega) \\ &= \int_0^\infty d\omega \omega \text{tr}[I_\alpha(\omega)\tilde{A}_k^T(i\omega)I_\beta(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_k^*(i\omega)]n_\alpha^0(\omega) \\ &= \int_0^\infty d\omega \omega \text{tr}[I_\beta(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_k(i\omega)I_\alpha(\omega)I_\beta(\omega + k\omega_d)\tilde{A}_k^\dagger(i\omega)]n_\alpha^0(\omega)\end{aligned}\tag{A.47}$$

Ahora reemplazamos en la Ec. (A.45):

$$\begin{aligned}
\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} &= \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST} + \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{NR} \\
&+ \frac{\pi}{2} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] n_\beta(\omega)^0 \\
&- \frac{\pi}{2} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega (\omega + k\omega_d) \text{tr}[I_\beta(\omega) \tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)] I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]] \\
&\times n_\alpha^0(\omega + k\omega_d) \\
&+ \frac{\pi}{2} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega \omega \text{tr}[I_\alpha(\omega) \tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)] I_\beta(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]] n_\beta^0(\omega + k\omega_d) \\
&- \frac{\pi}{2} \hbar \tau_d \sum_{\beta} \sum_{k>0} \int_0^\infty d\omega \omega \text{tr}[I_\beta(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_\alpha(\omega) I_\beta(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] n_\alpha^0(\omega).
\end{aligned} \tag{A.48}$$

Sólo resta identificar $(\pi/2)\text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] = p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega)$ para ver que los últimos cuatro sumandos de la Ec. (A.48) corresponden a la contribución de los términos resonantes que se muestra en la Ec. (3.23). Finalmente, llegamos a que el calor intercambiado $\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}$ se puede escribir como suma de tres contribuciones,

$$\bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha} = \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{ST} + \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^R + \bar{Q}_{\mathcal{E}_\alpha}^{NR}, \tag{A.49}$$

que era lo que queríamos demostrar.

A.2 Propiedades de las tasas de transición y emisión

En esta sección vamos a demostrar dos cosas. Primero, que las tasas $p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega)$ y $\tilde{p}_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega)$ son números positivos. Y segundo, la propiedad de balance detallado que mostramos en el Ec.(3.24). Es decir, que las tasas de transición de procesos opuestos son iguales : $p_{\beta,\alpha}^{(-k)}(\omega + k\omega_d) = p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega)$.

Para demostrar que las tasas son números positivos vamos a apelar a su definición,

$$p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) = \frac{\pi}{2} \text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] \tag{A.50}$$

y

$$\tilde{p}_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) = \frac{\pi}{2} \text{tr}[I_\alpha(k\omega_d - \omega) \tilde{A}_{-k}(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_{-k}^\dagger(i\omega)], \tag{A.51}$$

y usar que la densidad espectral I_α es una matriz real, simétrica, y semidefinida positiva, por lo que es diagonalizable y sus autovalores son números positivos o cero. Entonces, para calcular las trazas consideramos la base de sus autovectores $\{|\lambda_{\alpha,i}(\omega)\rangle\}$ con autovalores asociados $\{\lambda_{\alpha,i}(\omega)\}$, de modo tal que

$$I_\alpha(\omega) |\lambda_{\alpha,i}(\omega)\rangle = \lambda_{\alpha,i}(\omega) |\lambda_{\alpha,i}(\omega)\rangle, \tag{A.52}$$

y escribimos

$$p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_i \lambda_{\alpha,i}(\omega + k\omega_d) \langle \lambda_{\alpha,i}(\omega + k\omega_d) | \tilde{A}_k(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega) | \lambda_{\alpha,i}(\omega + k\omega_d) \rangle \tag{A.53}$$

y

$$\tilde{p}_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_i \lambda_{\alpha,i}(k\omega_d - \omega) \langle \lambda_{\alpha,i}(k\omega_d - \omega) | \tilde{A}_{-k}(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_{-k}^\dagger(i\omega) | \lambda_{\alpha,i}(k\omega_d - \omega) \rangle. \quad (\text{A.54})$$

Ahora notamos que

$$\langle \lambda_{\alpha,i}(\omega + k\omega_d) | \tilde{A}_k(i\omega) = [\tilde{A}_k^\dagger(i\omega) | \lambda_{\alpha,i}(\omega + k\omega_d) \rangle]^\dagger \quad (\text{A.55})$$

y

$$\langle \lambda_{\alpha,i}(k\omega_d - \omega) | \tilde{A}_{-k}(i\omega) = [\tilde{A}_{-k}^\dagger(i\omega) | \lambda_{\alpha,i}(k\omega_d - \omega) \rangle]^\dagger \quad (\text{A.56})$$

y, por lo tanto, al ser matrices semidefinidas positivas,

$$\langle \lambda_{\alpha,i}(\omega + k\omega_d) | \tilde{A}_k(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega) | \lambda_{\alpha,i}(\omega + k\omega_d) \rangle \geq 0 \quad (\text{A.57})$$

y

$$\langle \lambda_{\alpha,i}(k\omega_d - \omega) | \tilde{A}_{-k}(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_{-k}^\dagger(i\omega) | \lambda_{\alpha,i}(k\omega_d - \omega) \rangle \geq 0. \quad (\text{A.58})$$

Luego, concluimos que $p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) \geq 0$ y $\tilde{p}_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega) \geq 0$, como queríamos demostrar.

Para demostrar que las tasas de transición de procesos opuestos son iguales, simplemente escribimos una de ellas y usamos la propiedad de traslación del argumento de los \tilde{A}_k y que la traza de una matriz es igual a la traza de su traspuesta:

$$\begin{aligned} p_{\beta,\alpha}^{(-k)}(\omega + k\omega_d) &= \frac{\pi}{2} \text{tr}[I_\beta(\omega) \tilde{A}_{-k}[i(\omega + k\omega_d)] I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_{-k}^\dagger[i(\omega + k\omega_d)]] \\ &= \frac{\pi}{2} \text{tr}[I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^T(i\omega) I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k^*(i\omega)] \\ &= \frac{\pi}{2} \text{tr}[I_\alpha(\omega + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) I_\beta(\omega) \tilde{A}_k^\dagger(i\omega)] \\ &= p_{\alpha,\beta}^{(k)}(\omega). \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

Apéndice B

Matriz de covariancia

En este apéndice vamos a realizar todos los cálculos pertinentes a la matriz de covariancia de uno y dos modos, utilizada en el **Capítulo 4**. Vamos a calcular todos los elementos de las matrices α , β , y γ , probar la descomposición mostrada en la Ec. (4.25), y estudiar su comportamiento a tiempos largos.

B.1 Elementos de la matriz de covariancia

Recordamos que para obtener los elementos de la matriz de covariancia de dos bandas, primero debemos encontrar los elementos de matriz correspondientes a dos osciladores de frecuencias $\omega_i \in \mathcal{E}_R$ y $\omega_j \in \mathcal{E}_L$ de reservorios discretos y luego pasar al límite continuo haciendo la identificación $c_{\alpha,n}^2/m_n\omega_n \rightarrow \Delta\omega I_\alpha(\omega_n)$. Para ello, comenzamos escribiendo la evolución temporal de las coordenadas de un oscilador de frecuencia $\omega_n \in \mathcal{E}_\alpha$ (recordar que \mathcal{S} ahora está constituido por un solo oscilador):

$$q_n(t) = q_n^h(t) - \frac{c_{\alpha,n}}{m_n\omega_n} \int_0^t dt' \sin[\omega_n(t-t')]x(t') \quad (\text{B.1})$$

$$p_n(t) = p_n^h(t) - c_{\alpha,n} \int_0^t dt' \cos[\omega_n(t-t')]x(t') \quad (\text{B.2})$$

donde

$$q_n^h(t) = \cos(\omega_n t)q_n^0 + \frac{1}{m_n\omega_n} \sin(\omega_n t)p_n^0, \quad (\text{B.3})$$

$$p_n^h(t) = -m_n\omega_n \sin(\omega_n t)q_n^0 + \cos(\omega_n t)p_n^0, \quad (\text{B.4})$$

y

$$x(t) = x^h(t) - \int_0^t dt' G(t,t') \left[\sum_\beta \sum_m c_{\beta,m} q_m^h(t') \right]. \quad (\text{B.5})$$

Con estas ecuaciones más la relación

$$\langle \{q_n^h(t_1), q_m^h(t_2)\} \rangle = \frac{\hbar}{m_n\omega_n} \coth\left(\frac{\hbar\omega_n}{2k_B T_\alpha}\right) \text{Re}[e^{i\omega_n(t_1-t_2)}] \delta_{n,m}, \quad (\text{B.6})$$

podemos calcular todos los elementos de matriz necesarios. Vamos a empezar con α , definida como

$$\alpha(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \langle \{q_i(t), q_i(t)\} \rangle & \langle \{q_i(t), p_i(t)\} \rangle \\ \langle \{q_i(t), p_i(t)\} \rangle & \langle \{p_i(t), p_i(t)\} \rangle \end{pmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

recordando además que debemos adimensionalizar correctamente las coordenadas. La matriz β va a ser igual, solo que haciendo los reemplazos $i \rightarrow j$ y $R \rightarrow L$. Vamos a calcular explícitamente el primer elemento, α_{11} , y mostrar el resultado de los demás. Éste es:

$$\begin{aligned} \alpha_{11}(t) &= \frac{m_i \omega_i}{2\hbar} \langle \{q_i(t), q_i(t)\} \rangle \\ &= \frac{m_i \omega_i}{2\hbar} \langle \{q_i^h(t), q_i^h(t)\} \rangle \\ &\quad - \frac{c_{R,i}}{\hbar} \int_0^t dt' \sin[\omega_i(t-t')] \langle \{q_i^h(t), x(t')\} \rangle \\ &\quad + \frac{1}{2\hbar} \frac{c_{R,i}^2}{m_i \omega_i} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x(t_1), x(t_2)\} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Para continuar, usamos que

$$\langle \{q_i^h(t), q_i^h(t)\} \rangle = \frac{\hbar}{m_i \omega_i} \coth\left(\frac{\hbar \omega_i}{2k_B T_R}\right), \quad (\text{B.9})$$

$$\langle \{q_i^h(t), x(t')\} \rangle = -\frac{\hbar c_{R,i}}{m_i \omega_i} \coth\left(\frac{\hbar \omega_i}{2k_B T_R}\right) \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) \text{Re}[e^{i\omega_i(t-t'_1)}], \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} \langle \{x(t_1), x(t_2)\} \rangle &= \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\ &\quad + \hbar \sum_{\beta, m} \frac{c_{\beta, m}^2}{m_m \omega_m} \coth\left(\frac{\hbar \omega_m}{2k_B T_\beta}\right) \int_0^{t_1} dt'_1 \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_1, t'_1) G(t_2, t'_2) \text{Re}[e^{i\omega_m(t'_1-t'_2)}]. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Entonces, reemplazando las Ecs. (B.9), (B.10) y (B.11) en la Ec. (B.8) α_{11} nos queda:

$$\begin{aligned} \alpha_{11}(t) &= \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\hbar \omega_i}{2k_B T_R}\right) \\ &\quad + \frac{1}{2\hbar} \frac{c_{R,i}^2}{m_i \omega_i} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\ &\quad + \frac{c_{R,i}^2}{m_i \omega_i} \coth\left(\frac{\hbar \omega_i}{2k_B T_R}\right) \int_0^t dt' \sin[\omega_i(t-t')] \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) \text{Re}[e^{i\omega_i(t-t'_1)}] \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{c_{R,i}^2}{m_i \omega_i} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \\ &\quad \times \sum_{\beta, m} \frac{c_{\beta, m}^2}{m_m \omega_m} \coth\left(\frac{\hbar \omega_m}{2k_B T_\beta}\right) \int_0^{t_1} dt'_1 \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_1, t'_1) G(t_2, t'_2) \text{Re}[e^{i\omega_m(t'_1-t'_2)}]. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Ahora reorganizamos términos, hacemos la identificación $c_{R,i}^2/m_i \omega_i \rightarrow \Delta \omega I_R(\omega_i)$ y utilizamos la definición de la densidad espectral en el último sumando del lado derecho de la Ec.

(B.12):

$$\begin{aligned}
\alpha_{11}(t) &= \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \\
&+ \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
&+ \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \operatorname{Re} \left[e^{i\omega_i t} \int_0^t dt' \sin[\omega_i(t-t')] \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
&+ \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \operatorname{Re} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \right. \\
&\times \left. \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right].
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Para seguir vamos a utilizar una relación que es consecuencia de la evolución global unitaria. Debido a que, inicialmente, $[q_i^0, p_i^0] = i\hbar\mathbb{1}$, entonces $[q_i(t), p_i(t)] = i\hbar\mathbb{1} \forall t$. Un cálculo directo nos lleva a

$$\begin{aligned}
i\hbar &= \langle [q_i^h(t), p_i^h(t)] \rangle \\
&- c_{R,i} \int_0^t dt' \cos[\omega_i(t-t')] \langle [q_i^h(t), x(t')] \rangle \\
&- \frac{c_{R,i}}{m_i \omega_i} \int_0^t dt' \sin[\omega_i(t-t')] \langle [x(t'), p_i^h(t)] \rangle \\
&+ \frac{c_{R,i}^2}{m_i \omega_i} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle [x(t_1), x(t_2)] \rangle.
\end{aligned} \tag{B.14}$$

Ahora usamos que

$$\langle [q_i^h(t), p_i^h(t)] \rangle = i\hbar, \tag{B.15}$$

$$\langle [q_i^h(t), x(t')] \rangle = i\hbar \frac{c_{R,i}}{m_i \omega_i} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) \operatorname{Im}[e^{i\omega_i(t-t'_1)}], \tag{B.16}$$

$$\langle [x(t'), p_i^h(t)] \rangle = -i\hbar c_{R,i} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) \operatorname{Re}[e^{i\omega_i(t-t'_1)}], \tag{B.17}$$

y

$$\begin{aligned}
\langle [x(t_1), x(t_2)] \rangle &= \langle [x^h(t_1), x^h(t_2)] \rangle \\
&- i\hbar \sum_{\beta, m} \frac{c_{\beta, m}^2}{m_m \omega_m} \int_0^{t_1} dt'_1 \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_1, t'_1) G(t_2, t'_2) \operatorname{Im}[e^{i\omega_m(t'_1-t'_2)}]
\end{aligned} \tag{B.18}$$

para reescribir la Ec. (B.14):

$$\begin{aligned}
0 = & \operatorname{Im} \left[e^{i\omega_i t} \int_0^t dt' \cos[\omega_i(t-t')] \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& - \operatorname{Re} \left[e^{i\omega_i t} \int_0^t dt' \sin[\omega_i(t-t')] \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& - \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle [x^h(t_1), x^h(t_2)] \rangle \\
& + \operatorname{Im} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \right. \\
& \left. \times \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right].
\end{aligned} \tag{B.19}$$

Finalmente escribimos el coseno y el seno del primer y segundo del lado derecho de la Ec. (B.19) como suma y resta de exponenciales imaginarias, respectivamente:

$$\begin{aligned}
& \operatorname{Im} \left[\int_0^t dt' e^{i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle i[x^h(t_1), x^h(t_2)] \rangle \\
& - \operatorname{Im} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \right. \\
& \left. \times \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right]
\end{aligned} \tag{B.20}$$

Ahora tomamos la expresión de α_{11} en la Ec. (B.13), escribimos el seno del tercer sumando del lado derecho como resta de exponenciales imaginarias y utilizamos la Ec. (B.20):

$$\begin{aligned}
\alpha_{11}(t) = & \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \\
& + \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle i[x^h(t_1), x^h(t_2)] \rangle \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \text{Im} \left[e^{2i\omega_i t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \text{Im} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \right. \\
& \times \left. \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right] \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \text{Re} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \right. \\
& \times \left. \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right].
\end{aligned} \tag{B.21}$$

Para llegar a la expresión final, solo resta escribir el coseno y los senos de los últimos dos sumandos de la Ec. (B.21) como suma y resta de exponenciales imaginarias y agrupar térmi-

nos:

$$\begin{aligned}
\alpha_{11}(t) = & \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \\
& + \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle i[x^h(t_1), x^h(t_2)] \rangle \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \text{Im} \left[e^{2i\omega_i t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& + \frac{1}{8} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \left[\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) - \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \right] \\
& \times \text{Re} \left[\int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{i\omega_i t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right] \\
& + \frac{1}{8} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \left[\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) + \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \right] \\
& \times \text{Re} \left[\int_0^t dt_1 e^{i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_i t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right] \\
& - \frac{1}{4} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) \\
& \times \text{Re} \left[e^{2i\omega_i t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_i t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right]
\end{aligned}$$

(B.22)

Cálculos completamente análogos nos llevan a las expresiones de α_{22} y $\alpha_{12} = \alpha_{21}$:

$$\begin{aligned}
\alpha_{22}(t) = & \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \\
& + \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \cos[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \\
& \times \langle i[x^h(t_1), x^h(t_2)] \rangle \\
& - \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \text{Im} \left[e^{2i\omega_i t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& + \frac{1}{8} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \left[\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) - \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \right] \\
& \times \text{Re} \left[\int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{i\omega_i t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right] \\
& + \frac{1}{8} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \left[\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) + \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \right] \\
& \times \text{Re} \left[\int_0^t dt_1 e^{i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_i t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) \\
& \times \text{Re} \left[e^{2i\omega_i t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_i t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right]
\end{aligned}
\tag{B.23}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_{12}(t) = & \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \text{Re} \left[e^{2i\omega_i t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) \\
& \times \text{Im} \left[e^{2i\omega_i t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_i t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right].
\end{aligned}
\tag{B.24}$$

Como dijimos antes, los elementos de $\boldsymbol{\beta}$ se obtienen haciendo los reemplazos $i \rightarrow j$ y $R \rightarrow L$ en las Ecs. (B.22), (B.23) y (B.24). Ahora pasamos a mostrar los elementos de $\boldsymbol{\gamma}$:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{11}(t) = & \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_j(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_j t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right. \\
& \left. - e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{i\omega_j t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \coth\left(\frac{\hbar\omega_j}{2k_B T_L}\right) \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_j t'_1} \right. \\
& \left. - e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_j t'_1} \right] \\
& - \frac{1}{8} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) \\
& \times \text{Re} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right. \\
& + e^{-i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \\
& - e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \\
& \left. - e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right]
\end{aligned}$$

(B.25)

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{22}(t) = & \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \cos[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_j(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& - \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_j t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right. \\
& \left. + e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{i\omega_j t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& - \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \coth\left(\frac{\hbar\omega_j}{2k_B T_L}\right) \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_j t'_1} \right. \\
& \left. + e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_j t'_1} \right] \\
& + \frac{1}{8} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) \\
& \times \text{Re} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right. \\
& + e^{-i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \\
& + e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \\
& \left. + e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right]
\end{aligned}$$

(B.26)

$$\begin{aligned}
\gamma_{12}(t) = & \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_j(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \coth\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T_R}\right) \operatorname{Re} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_j t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right. \\
& \left. + e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{i\omega_j t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_i t'_1} \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \coth\left(\frac{\hbar\omega_j}{2k_B T_L}\right) \operatorname{Re} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{-i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_j t'_1} \right. \\
& \left. - e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt' e^{i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'_1 G(t', t'_1) e^{-i\omega_j t'_1} \right] \\
& + \frac{1}{8} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_{\beta}}\right) \\
& \times \operatorname{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right. \\
& - e^{-i(\omega_i+\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \\
& + e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \\
& \left. - e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_i t_1} \int_0^{t_1} dt'_1 G(t_1, t'_1) e^{i\omega t'_1} \int_0^t dt_2 e^{-i\omega_j t_2} \int_0^{t_2} dt'_2 G(t_2, t'_2) e^{-i\omega t'_2} \right]
\end{aligned}
\tag{B.27}$$

y γ_{21} es obtenido a partir de γ_{12} intercambiando los índices i y R por j y L , respectivamente. Notar que para α_{12} , β_{12} , y todos los elementos de γ no hay que utilizar la relación de la Ec. (B.20).

B.2 Comportamiento a tiempos largos

Para estudiar el comportamiento a tiempos largos de α , β , y γ , vamos a definir una función que va a simplificar la notación y reducir los cálculos:

$$\mathcal{J}(\omega, \omega_n, t) \doteq \int_0^t dt' e^{-i\omega_n t'} \int_0^{t'} dt'' G(t', t'') e^{i\omega t''}. \tag{B.28}$$

Vamos a reescribir los elementos de matriz que encontramos en la sección anterior (las Ecs. (B.22), (B.23), (B.24), (B.25), (B.26) y (B.27)) en función de \mathcal{J} (además, para reducir el tamaño de las expresiones, vamos a usar que $\coth(\hbar\omega/2k_B T_{\alpha}) = 2n_{\alpha}(\omega) + 1$, con n_{α} la distribución

de Planck):

$$\begin{aligned}
\alpha_{11}(t) = & \frac{1}{2} + n_R(\omega_i) \\
& + \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) [n_R(\omega_i) + 1/2] \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle i[x^h(t_1), x^h(t_2)] \rangle \\
& + \Delta\omega I_R(\omega_i) [n_R(\omega_i) + 1/2] \text{Im} \left[e^{2i\omega_i t} \mathcal{J}(-\omega_i, \omega_i, t) \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) - n_R(\omega_i)] \text{Re} \left[\mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_i, t) \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) + n_R(\omega_i) + 1] \text{Re} \left[\mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_i, t) \right] \\
& - \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) + 1/2] \text{Re} \left[e^{2i\omega_i t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_i, t) \right]
\end{aligned}
\tag{B.29}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_{22}(t) = & \frac{1}{2} + n_R(\omega_i) \\
& + \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \cos[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) [n_R(\omega_i) + 1/2] \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle i[x^h(t_1), x^h(t_2)] \rangle \\
& - \Delta\omega I_R(\omega_i) [n_R(\omega_i) + 1/2] \text{Im} \left[e^{2i\omega_i t} \mathcal{J}(-\omega_i, \omega_i, t) \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) - n_R(\omega_i)] \text{Re} \left[\mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_i, t) \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) + n_R(\omega_i) + 1] \text{Re} \left[\mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_i, t) \right] \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) + 1/2] \text{Re} \left[e^{2i\omega_i t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_i, t) \right]
\end{aligned}
\tag{B.30}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_{12}(t) = & \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega I_R(\omega_i) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_i(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \Delta\omega I_R(\omega_i) [n_R(\omega_i) + 1/2] \text{Re} \left[e^{2i\omega_i t} \mathcal{J}(-\omega_i, \omega_i, t) \right] \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) + 1/2] \text{Im} \left[e^{2i\omega_i t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_i, t) \right].
\end{aligned}$$

(B.31)

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{11}(t) = & \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \sin[\omega_j(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_R(\omega_i) + 1/2] \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_i, -\omega_j, t) - e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_i, \omega_j, t) \right] \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_L(\omega_j) + 1/2] \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_j, -\omega_i, t) - e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_j, \omega_i, t) \right] \\
& - \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) + 1/2] \\
& \times \text{Re} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t) + e^{-i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_j, t) \right. \\
& \left. - e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_j, t) - e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t) \right]
\end{aligned}
\tag{B.32}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{22}(t) = & \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \cos[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_j(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& - \frac{1}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_R(\omega_i) + 1/2] \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_i, -\omega_j, t) + e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_i, \omega_j, t) \right] \\
& - \frac{1}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_L(\omega_j) + 1/2] \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_j, -\omega_i, t) + e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_j, \omega_i, t) \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) + 1/2] \\
& \times \text{Re} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t) + e^{-i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_j, t) \right. \\
& \left. + e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_j, t) + e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t) \right]
\end{aligned}
\tag{B.33}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{12}(t) = & \frac{1}{2\hbar} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sin[\omega_i(t-t_1)] \cos[\omega_j(t-t_2)] \langle \{x^h(t_1), x^h(t_2)\} \rangle \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_R(\omega_i) + 1/2] \text{Re} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_i, -\omega_j, t) + e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_i, \omega_j, t) \right] \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_L(\omega_j) + 1/2] \text{Re} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_j, -\omega_i, t) - e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}^*(\omega_j, \omega_i, t) \right] \\
& + \frac{1}{4} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\omega I_{\beta}(\omega) [n_{\beta}(\omega) + 1/2] \\
& \times \text{Im} \left[e^{i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t) - e^{-i(\omega_i+\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_j, t) \right. \\
& \left. + e^{i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_j, t) - e^{-i(\omega_i-\omega_j)t} \mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t) \right]
\end{aligned}
\tag{B.34}$$

Como vemos, la evolución temporal de todos los elementos de matriz está completamente determinada por la función \mathcal{J} (salvo por los términos que dependen del estado inicial de \mathcal{S} que, como ya vimos, decaen a tiempos largos). Por lo tanto, basta con estudiar el comportamiento a tiempos largos de \mathcal{J} . Para ello, es instructivo escribirla de otra forma. Usando que G se puede descomponer como en la Ec. (2.24), y haciendo un cambio en el orden de

integración, obtenemos:

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(\omega, \omega_n, t) &= \sum_k \int_0^t dt' e^{i(\omega - \omega_n + k\omega_d)t'} \int_0^{t'} dt'' A_k(t'') e^{-i\omega t''} \\ &= \sum_k \left\{ t \operatorname{sinc}[(\omega - \omega_n + k\omega_d)t/2] a_k(i\omega) e^{i(\omega - \omega_n + k\omega_d)t/2} + F_k(\omega, \omega_n) \right\},\end{aligned}\quad (\text{B.35})$$

donde definimos

$$a_k(i\omega) = \int_0^t dt' A_k(t') e^{-i\omega t'} \quad (\text{B.36})$$

y

$$F_k(\omega, \omega_n) = \frac{a_k(i\omega) - a_k[i(\omega_n - k\omega_d)]}{i(\omega - \omega_n + k\omega_d)}. \quad (\text{B.37})$$

Las funciones a_k y F_k son funciones de la variable t , pero omitimos escribirlo explícitamente en un esfuerzo por mantener la notación simple. Además, es importante notar que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} a_k(i\omega) = \tilde{A}_k(i\omega) \quad (\text{B.38})$$

y

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F_k(\omega, \omega_i) = \tilde{F}_k(\omega, \omega_i) \doteq \frac{\tilde{A}_k(i\omega) - \tilde{A}_k[i(\omega_i - k\omega_d)]}{i(\omega - \omega_i + k\omega_d)}. \quad (\text{B.39})$$

Hay dos casos generales distintos para analizar en las Ecs. (B.29), (B.30), (B.31), (B.32), (B.33) y (B.34) con respecto al comportamiento de \mathcal{J} . Por un lado tenemos términos en los que \mathcal{J} está simplemente evaluado, como por ejemplo el cuarto sumando del lado derecho de la Ec. (B.29), en el que aparece $\mathcal{J}(-\omega_i, \omega_i, t)$, o el segundo sumando del lado derecho de la Ec. (B.32), en el que aparece $\mathcal{J}^*(\omega_i, -\omega_j, t)$. Por el otro, hay términos donde un producto de dos funciones \mathcal{J} está integrado en su primer argumento, como en el quinto sumando del lado derecho de la Ec. (B.32), en el que aparece $\mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t)$ integrado en ω . En ambos casos nos interesa encontrar bajo qué condiciones aparecen términos lineales en el tiempo, pero se analizan de forma ligeramente distinta. Comenzamos con el primer caso, en el que están solo evaluados. Según vemos en la Ec. (B.35), los términos lineales aparecen cuando la función sinc se anula. Es decir, cuando $\omega = \omega_n - k\omega_d$. Entonces:

- En α aparece $\mathcal{J}(-\omega_i, \omega_i, t)$ que tiene términos lineales si $2\omega_i = k\omega_d$. Para simplificar el análisis vamos a suponer que estamos en el caso en que ni ω_i ni ω_j son conmensurables con ω_d (luego extenderemos nuestros resultados a ese caso mediante continuación analítica). Por lo tanto, no hay términos lineales provenientes de ese sumando.
- En β aparece $\mathcal{J}(-\omega_j, \omega_j, t)$ que tampoco tiene términos lineales por lo discutido en el caso anterior.
- En γ aparecen cuatro términos distintos. Primero tenemos dos términos, $\mathcal{J}^*(\omega_i, -\omega_j, t)$ y $\mathcal{J}^*(\omega_j, -\omega_i, t)$, que presentan términos lineales solo si $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$ (es decir, si las bandas están conectadas mediante creación de pares de excitaciones), y segundo otros dos, $\mathcal{J}^*(\omega_i, \omega_j, t)$ y $\mathcal{J}^*(\omega_j, \omega_i, t)$, que presentan términos lineales solo si $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$ (es decir, si las bandas están conectadas mediante transporte de excitaciones). Esta diferencia es fundamental ya que tiene como consecuencia que las correlaciones producidas en los dos casos sean distintas.

Para el segundo caso tenemos que entender cómo se comporta el producto de funciones \mathcal{J} a tiempos largos dentro de una integral. Para ello vamos a hacer uso de dos representaciones de la delta de Dirac:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} t \operatorname{sinc}(\omega t/2) = 2\pi\delta(\omega) \quad (\text{B.40})$$

y

$$\lim_{t \rightarrow \infty} t \operatorname{sinc}^2(\omega t/2) = 2\pi\delta(\omega). \quad (\text{B.41})$$

Ahora escribimos el producto de forma general y agrupamos términos de modo que consigamos formar las dos representaciones de arriba:

$$\begin{aligned} & \mathcal{J}(\omega, \omega_n, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_m, t) \\ &= \sum_k t^2 \operatorname{sinc}^2[(\omega - \omega_n + k\omega_d)t/2] a_k(i\omega) a_{l'}(i\omega) \\ &+ \sum_k \sum_{l \neq l'} t^2 \operatorname{sinc}[(\omega - \omega_n + k\omega_d)t/2] \operatorname{sinc}[(\omega - \omega_m + l\omega_d)t/2] a_k(i\omega) a_l(i\omega) e^{i[\omega_m - \omega_n + (k-l)\omega_d]t/2} \\ &+ \sum_{k,l} t \operatorname{sinc}[(\omega - \omega_n + k\omega_d)t/2] a_k(i\omega) e^{i(\omega - \omega_n + k\omega_d)t/2} F_l^*(\omega, \omega_m) \\ &+ \sum_{k,l} t \operatorname{sinc}[(\omega - \omega_m + l\omega_d)t/2] a_l^*(i\omega) e^{i(\omega - \omega_m + l\omega_d)t/2} F_k(\omega, \omega_n) \\ &+ \sum_{k,l} F_k(\omega, \omega_n) F_l^*(\omega, \omega_m) \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

donde $l' = k + (\omega_m - \omega_n)/\omega_d$ tiene que ser un número entero (para ello, ω_n y ω_m deben ser tales que su diferencia sea un múltiplo de ω_d). En la Ec. (B.42) vemos que el único sumando que puede producir términos lineales en el tiempo es el primero:

$$\sum_k t^2 \operatorname{sinc}^2[(\omega - \omega_n + k\omega_d)t/2] a_k(i\omega) a_{l'}(i\omega) \rightarrow 2\pi t \sum_k \delta(\omega - \omega_n + k\omega_d) \tilde{A}_k(i\omega) \tilde{A}_{l'}(i\omega) \quad (\text{B.43})$$

A tiempos largos todo el resto son oscilantes o tienden a una constante. Entonces:

- En α hay tres productos que analizar. Dos de ellos producen términos lineales, que son $\mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_i, t)$ y $\mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_i, t)$:

$$\mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, \omega_i, t) \rightarrow 2\pi t \sum_n \delta(\omega - \omega_i + n\omega_d) |\tilde{A}_n(i\omega)|^2 \quad (\text{B.44})$$

$$\mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_i, t) \rightarrow 2\pi t \sum_n \delta(\omega + \omega_i + n\omega_d) |\tilde{A}_n(i\omega)|^2 \quad (\text{B.45})$$

y el tercero, $\mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_i, t)$, no (recordar que estamos suponiendo que ni ω_i ni ω_j son conmensurables con ω_d).

- En β tenemos los mismos términos que en α , solo que cambiando ω_i por ω_j .
- En γ hay cuatro productos que analizar. Dos de ellos contribuyen cuando $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$ (es decir, si las bandas están conectadas mediante creación de pares de excitaciones),

$$\mathcal{J}(\omega, \omega_i, t) \mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t) \rightarrow 2\pi t \sum_n \delta(\omega - \omega_i + n\omega_d) \tilde{A}_n(i\omega) \tilde{A}_{n-k}^*(i\omega) \quad (\text{B.46})$$

y

$$\mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t)\mathcal{J}^*(\omega, \omega_j, t) \rightarrow 2\pi t \sum_n \delta(\omega + \omega_i + n\omega_d) \tilde{A}_n(i\omega) \tilde{A}_{n+k}^*(i\omega), \quad (\text{B.47})$$

y los otros dos cuando $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$ (es decir, si las bandas están conectadas mediante transporte de excitaciones),

$$\mathcal{J}(\omega, \omega_i, t)\mathcal{J}^*(\omega, \omega_j, t) \rightarrow 2\pi t \sum_n \delta(\omega - \omega_i + n\omega_d) \tilde{A}_n(i\omega) \tilde{A}_{n+k}^*(i\omega) \quad (\text{B.48})$$

y

$$\mathcal{J}(\omega, -\omega_i, t)\mathcal{J}^*(\omega, -\omega_j, t) \rightarrow 2\pi t \sum_n \delta(\omega + \omega_i + n\omega_d) \tilde{A}_n(i\omega) \tilde{A}_{n-k}^*(i\omega). \quad (\text{B.49})$$

Notar que los términos lineales en el tiempo en $\boldsymbol{\gamma}$, que es la matriz que almacena o describe las correlaciones entre las bandas de los reservorios, aparecen solo si las frecuencias en las que están centradas cumplen que $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$ o $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$. Es decir, solo si están relacionadas por procesos no resonantes o resonantes, respectivamente. Ningún otro proceso produce correlaciones entre ellas más allá del régimen transitorio.

Ahora que entendemos qué términos se comportan de forma lineal a tiempos largos, podemos escribir las expresiones de las matrices en ese límite, descartando todos los demás menos el de los estados iniciales:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}_{11}(t) \rightarrow & \\ & \frac{1}{2} + n_R(\omega_i) \\ & + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(\omega_i - n\omega_d) I_\beta(\omega_i - n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)]|^2 [n_\beta(\omega_i - n\omega_d) - n_R(\omega_i)] \times t \\ & + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(n\omega_d - \omega_i) I_\beta(n\omega_d - \omega_i) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)]|^2 [n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + n_R(\omega_i) + 1] \times t \end{aligned} \quad (\text{B.50})$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}_{22}(t) \rightarrow & \\ & \frac{1}{2} + n_R(\omega_i) \\ & + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(\omega_i - n\omega_d) I_\beta(\omega_i - n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)]|^2 [n_\beta(\omega_i - n\omega_d) - n_R(\omega_i)] \times t \\ & + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(n\omega_d - \omega_i) I_\beta(n\omega_d - \omega_i) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)]|^2 [n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + n_R(\omega_i) + 1] \times t \end{aligned} \quad (\text{B.51})$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}_{12}(t) &\rightarrow 0 \\ \boldsymbol{\alpha}_{21}(t) &\rightarrow 0 \end{aligned} \quad (\text{B.52})$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\beta}_{11}(t) \rightarrow & \\
& \frac{1}{2} + n_L(\omega_j) \\
& + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta,n} \Theta(\omega_j + n\omega_d) I_\beta(\omega_j + n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_j + n\omega_d)]|^2 [n_\beta(\omega_j + n\omega_d) - n_L(\omega_j)] \times t \\
& + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta,n} \Theta(n\omega_d - \omega_j) I_\beta(n\omega_d - \omega_j) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_j)]|^2 [n_\beta(n\omega_d - \omega_j) + n_L(\omega_j) + 1] \times t
\end{aligned} \tag{B.53}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\beta}_{22}(t) \rightarrow & \\
& \frac{1}{2} + n_L(\omega_j) \\
& + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta,n} \Theta(\omega_j + n\omega_d) I_\beta(\omega_j + n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_j + n\omega_d)]|^2 [n_\beta(\omega_j + n\omega_d) - n_L(\omega_j)] \times t \\
& + \frac{\pi}{2} \Delta\omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta,n} \Theta(n\omega_d - \omega_j) I_\beta(n\omega_d - \omega_j) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_j)]|^2 [n_\beta(n\omega_d - \omega_j) + n_L(\omega_j) + 1] \times t
\end{aligned} \tag{B.54}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\beta}_{12}(t) & \rightarrow 0 \\
\boldsymbol{\beta}_{21}(t) & \rightarrow 0
\end{aligned} \tag{B.55}$$

Antes de seguir, queremos remarcar que la expresión $\boldsymbol{\alpha}_{12}(t) \rightarrow 0$ y similares no significa que esos términos tiendan a cero a tiempos largos, sino que no son responsables de constantemente producir correlaciones más allá del régimen transitorio. Para $\boldsymbol{\gamma}$ tenemos que diferenciar dos casos: si $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$ o si $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$. Para el primero ($\omega_i + \omega_j = k\omega_d$) el resultado es:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{11}(t) \rightarrow & \frac{1}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_R(\omega_i) + 1/2] \text{Im} \left[e^{ik\omega_d t} \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_i) \right] \times t \\
& + \frac{1}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_L(\omega_j) + 1/2] \text{Im} \left[e^{ik\omega_d t} \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) \right] \times t \\
& - \frac{\pi}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta,n} \Theta(\omega_i - n\omega_d) I_\beta(\omega_i - n\omega_d) [n_\beta(\omega_i - n\omega_d) + 1/2] \\
& \times \text{Re} \left\{ e^{ik\omega_d t} \tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)] \tilde{A}_{n-k}^*[i(\omega_i - n\omega_d)] \right\} \times t \\
& - \frac{\pi}{2} \Delta\omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta,n} \Theta(n\omega_d - \omega_i) I_\beta(n\omega_d - \omega_i) [n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + 1/2] \\
& \times \text{Re} \left\{ e^{-ik\omega_d t} \tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)] \tilde{A}_{-n+k}^*[i(n\omega_d - \omega_i)] \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.56}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{22}(t) \rightarrow & -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_R(\omega_i)+1/2]\text{Im}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_i)\right]\times t \\
& -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_L(\omega_j)+1/2]\text{Im}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)\right]\times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(\omega_i-n\omega_d)I_\beta(\omega_i-n\omega_d)[n_\beta(\omega_i-n\omega_d)+1/2] \\
& \times\text{Re}\left\{e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_n[i(\omega_i-n\omega_d)]\tilde{A}_{n-k}^*[i(\omega_i-n\omega_d)]\right\}\times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(n\omega_d-\omega_i)I_\beta(n\omega_d-\omega_i)[n_\beta(n\omega_d-\omega_i)+1/2] \\
& \times\text{Re}\left\{e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d-\omega_i)]\tilde{A}_{-n+k}^*[i(n\omega_d-\omega_i)]\right\}\times t
\end{aligned} \tag{B.57}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{12}(t) \rightarrow & \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_R(\omega_i)+1/2]\text{Re}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_i)\right]\times t \\
& +\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_L(\omega_j)+1/2]\text{Re}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)\right]\times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(\omega_i-n\omega_d)I_\beta(\omega_i-n\omega_d)[n_\beta(\omega_i-n\omega_d)+1/2] \\
& \times\text{Im}\left\{e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_n[i(\omega_i-n\omega_d)]\tilde{A}_{n-k}^*[i(\omega_i-n\omega_d)]\right\}\times t \\
& -\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(n\omega_d-\omega_i)I_\beta(n\omega_d-\omega_i)[n_\beta(n\omega_d-\omega_i)+1/2] \\
& \times\text{Im}\left\{e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d-\omega_i)]\tilde{A}_{-n+k}^*[i(n\omega_d-\omega_i)]\right\}\times t
\end{aligned} \tag{B.58}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{21}(t) \rightarrow & \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_R(\omega_i)+1/2]\text{Re}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_i)\right]\times t \\
& +\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_L(\omega_j)+1/2]\text{Re}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)\right]\times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(\omega_j-n\omega_d)I_\beta(\omega_j-n\omega_d)[n_\beta(\omega_j-n\omega_d)+1/2] \\
& \times\text{Im}\left\{e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_n[i(\omega_j-n\omega_d)]\tilde{A}_{n-k}^*[i(\omega_j-n\omega_d)]\right\}\times t \\
& -\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(n\omega_d-\omega_j)I_\beta(n\omega_d-\omega_j)[n_\beta(n\omega_d-\omega_j)+1/2] \\
& \times\text{Im}\left\{e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d-\omega_j)]\tilde{A}_{-n+k}^*[i(n\omega_d-\omega_j)]\right\}\times t
\end{aligned} \tag{B.59}$$

Y para el segundo ($\omega_j = \omega_i + k\omega_d$):

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{11}(t) \rightarrow & -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_R(\omega_i) + 1/2]\text{Im}\left[e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_k^*(i\omega_i)\right] \times t \\
& -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_L(\omega_j) + 1/2]\text{Im}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)\right] \times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(\omega_i - n\omega_d)I_\beta(\omega_i - n\omega_d)[n_\beta(\omega_i - n\omega_d) + 1/2] \\
& \times \text{Re}\left\{e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)]\tilde{A}_{n+k}^*[i(\omega_i - n\omega_d)]\right\} \times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(n\omega_d - \omega_i)I_\beta(n\omega_d - \omega_i)[n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + 1/2] \\
& \times \text{Re}\left\{e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)]\tilde{A}_{-n-k}^*[i(n\omega_d - \omega_i)]\right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.60}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{22}(t) \rightarrow & -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_R(\omega_i) + 1/2]\text{Im}\left[e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_k^*(i\omega_i)\right] \times t \\
& -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_L(\omega_j) + 1/2]\text{Im}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)\right] \times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(\omega_i - n\omega_d)I_\beta(\omega_i - n\omega_d)[n_\beta(\omega_i - n\omega_d) + 1/2] \\
& \times \text{Re}\left\{e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)]\tilde{A}_{n+k}^*[i(\omega_i - n\omega_d)]\right\} \times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(n\omega_d - \omega_i)I_\beta(n\omega_d - \omega_i)[n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + 1/2] \\
& \times \text{Re}\left\{e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)]\tilde{A}_{-n-k}^*[i(n\omega_d - \omega_i)]\right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.61}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{12}(t) \rightarrow & \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_R(\omega_i) + 1/2]\text{Re}\left[e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_k^*(i\omega_i)\right] \times t \\
& -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}[n_L(\omega_j) + 1/2]\text{Re}\left[e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)\right] \times t \\
& +\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(\omega_i - n\omega_d)I_\beta(\omega_i - n\omega_d)[n_\beta(\omega_i - n\omega_d) + 1/2] \\
& \times \text{Im}\left\{e^{-ik\omega_d t}\tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)]\tilde{A}_{n+k}^*[i(\omega_i - n\omega_d)]\right\} \times t \\
& -\frac{\pi}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)}\sum_{\beta,n}\Theta(n\omega_d - \omega_i)I_\beta(n\omega_d - \omega_i)[n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + 1/2] \\
& \times \text{Im}\left\{e^{ik\omega_d t}\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)]\tilde{A}_{-n-k}^*[i(n\omega_d - \omega_i)]\right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.62}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_{21}(t) \rightarrow & \frac{1}{2} \Delta \omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_L(\omega_j) + 1/2] \operatorname{Re} \left[e^{ik\omega_d t} \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) \right] \times t \\
& - \frac{1}{2} \Delta \omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} [n_R(\omega_i) + 1/2] \operatorname{Re} \left[e^{-ik\omega_d t} \tilde{A}_k^*(i\omega_i) \right] \times t \\
& + \frac{\pi}{2} \Delta \omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta, n} \Theta(\omega_j - n\omega_d) I_\beta(\omega_j - n\omega_d) [n_\beta(\omega_j - n\omega_d) + 1/2] \\
& \times \operatorname{Im} \left\{ e^{ik\omega_d t} \tilde{A}_n[i(\omega_j - n\omega_d)] \tilde{A}_{n+k}^*[i(\omega_j - n\omega_d)] \right\} \times t \\
& - \frac{\pi}{2} \Delta \omega \sqrt{I_R(\omega_i) I_L(\omega_j)} \sum_{\beta, n} \Theta(n\omega_d - \omega_j) I_\beta(n\omega_d - \omega_j) [n_\beta(n\omega_d - \omega_j) + 1/2] \\
& \times \operatorname{Im} \left\{ e^{-ik\omega_d t} \tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_j)] \tilde{A}_{-n-k}^*[i(n\omega_d - \omega_j)] \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.63}$$

En todas las expresiones anteriores Θ es la función escalón de Heaviside:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases} \tag{B.64}$$

B.3 Invariantes simplécticos

Ahora pasamos a calcular los tres invariantes simplécticos en el límite de tiempos largos y acoplamiento débil (ss decir, a orden más bajo en γ_0): las purezas de las bandas $\mu_{i,j}$, y el determinante de la matriz $\boldsymbol{\gamma}$. Las purezas son las más sencillas de calcular ya que no dependen de la relación entre ω_i y ω_j . Recordamos que

$$\mu_i = \frac{1}{2\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}}} \tag{B.65}$$

y

$$\mu_j = \frac{1}{2\sqrt{\det \boldsymbol{\beta}}}. \tag{B.66}$$

Usando las Ecs. (B.50), (B.51) y (B.52) vemos que

$$\begin{aligned}
1/\mu_i = & 1 + 2n_R(\omega_i) \\
& + \pi \Delta \omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(\omega_i - n\omega_d) I_\beta(\omega_i - n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_i - n\omega_d)]|^2 \\
& \times [n_\beta(\omega_i - n\omega_d) - n_R(\omega_i)] \times t \\
& + \pi \Delta \omega I_R(\omega_i) \sum_{\beta, n} \Theta(n\omega_d - \omega_i) I_\beta(n\omega_d - \omega_i) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_i)]|^2 \\
& \times [n_\beta(n\omega_d - \omega_i) + n_R(\omega_i) + 1] \times t,
\end{aligned} \tag{B.67}$$

y usando las Ecs. (B.53), (B.54) y (B.55) obtenemos

$$\begin{aligned}
& 1/\mu_j = 1 + 2n_L(\omega_j) \\
& + \pi\Delta\omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta,n} \Theta(\omega_j + n\omega_d) I_\beta(\omega_j + n\omega_d) |\tilde{A}_n[i(\omega_j + n\omega_d)]|^2 \\
& \times [n_\beta(\omega_j + n\omega_d) - n_L(\omega_j)] \times t \\
& + \pi\Delta\omega I_L(\omega_j) \sum_{\beta,n} \Theta(n\omega_d - \omega_j) I_\beta(n\omega_d - \omega_j) |\tilde{A}_{-n}[i(n\omega_d - \omega_j)]|^2 \\
& \times [n_\beta(n\omega_d - \omega_j) + n_L(\omega_j) + 1] \times t.
\end{aligned} \tag{B.68}$$

Las componentes de la matriz $\boldsymbol{\gamma}$ en el límite de tiempos largos y acoplamiento débil para el caso $\omega_i + \omega_j = k\omega_d$ son:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{11}(t) & \rightarrow -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
& \times \text{Im} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_i) e^{-ik\omega_d t} + [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_j) e^{-ik\omega_d t} \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.69}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{22}(t) & \rightarrow \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
& \times \text{Im} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_i) e^{-ik\omega_d t} + [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_j) e^{-ik\omega_d t} \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.70}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{12}(t) & \rightarrow \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
& \times \text{Re} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_i) e^{-ik\omega_d t} + [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_j) e^{-ik\omega_d t} \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.71}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{21}(t) & \rightarrow \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
& \times \text{Re} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_i) e^{-ik\omega_d t} + [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_j) e^{-ik\omega_d t} \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.72}$$

Por lo tanto, tenemos

$$\det \boldsymbol{\gamma} = -\frac{1}{4}\Delta\omega^2 I_R(\omega_i) I_L(\omega_j) \left| [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_i) + [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}(i\omega_j) \right|^2 \times t^2. \tag{B.73}$$

En el otro caso, en que $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$, las componentes son:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{11}(t) & \rightarrow \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
& \times \text{Im} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_k(i\omega_i) e^{ik\omega_d t} - [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) e^{ik\omega_d t} \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.74}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{22}(t) & \rightarrow \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
& \times \text{Im} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_k(i\omega_i) e^{ik\omega_d t} - [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) e^{ik\omega_d t} \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.75}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\gamma}_{12}(t) & \rightarrow \frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\
& \times \text{Re} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2] \tilde{A}_k(i\omega_i) e^{ik\omega_d t} - [n_L(\omega_j) + 1/2] \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) e^{ik\omega_d t} \right\} \times t
\end{aligned} \tag{B.76}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\gamma}_{21}(t) \rightarrow & -\frac{1}{2}\Delta\omega\sqrt{I_R(\omega_i)I_L(\omega_j)} \\ & \times \text{Re} \left\{ [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_k(i\omega_i)e^{ik\omega_d t} - [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)e^{ik\omega_d t} \right\} \times t \end{aligned} \quad (\text{B.77})$$

Por lo tanto, el resultado *a priori* es

$$\det \boldsymbol{\gamma} = \frac{1}{4}\Delta\omega^2 I_R(\omega_i)I_L(\omega_j) \left| [n_R(\omega_i) + 1/2]\tilde{A}_k(i\omega_i) - [n_L(\omega_j) + 1/2]\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) \right|^2 \times t^2. \quad (\text{B.78})$$

Vamos a ver que existe una relación no trivial entre $\tilde{A}_k(i\omega_i)$ y $\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)$ cuando $\omega_j = \omega_i + k\omega_d$ que modifica la Ec. (B.78) significativamente. Si hacemos uso nuevamente de que la evolución global es unitaria y, por lo tanto, $[q_i(t), q_j(t)] = 0 \forall t$, entonces viendo los términos lineales en el tiempo llegamos a

$$\begin{aligned} & \text{Re}[\tilde{A}_k(i\omega_i)e^{ik\omega_d t} - \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)e^{ik\omega_d t}] \\ & = \pi \text{Im} \left\{ \sum_n I(\omega_i - n\omega_d) \tilde{A}_n^*[i(\omega_i - n\omega_d)] \tilde{A}_{n+k}[i(\omega_i - n\omega_d)] e^{ik\omega_d t} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.79})$$

De la misma forma pero ahora usando que $[p_i(t), p_j(t)] = 0 \forall t$ obtenemos

$$\begin{aligned} & \text{Im}[\tilde{A}_k(i\omega_i)e^{ik\omega_d t} - \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j)e^{ik\omega_d t}] \\ & = -\pi \text{Re} \left\{ \sum_n I(\omega_i - n\omega_d) \tilde{A}_n^*[i(\omega_i - n\omega_d)] \tilde{A}_{n+k}[i(\omega_i - n\omega_d)] e^{ik\omega_d t} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.80})$$

Si combinamos las Ecs. (B.79) y (B.80) llegamos a que

$$\boxed{\tilde{A}_k(i\omega_i) - \tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) = -i\pi \sum_n I(\omega_i - n\omega_d) \tilde{A}_n^*[i(\omega_i - n\omega_d)] \tilde{A}_{n+k}[i(\omega_i - n\omega_d)]}, \quad (\text{B.81})$$

que es un término de un orden mayor en γ_0 . Entonces, a primer orden en γ_0 , el determinante de la matriz $\boldsymbol{\gamma}$ es en verdad

$$\boxed{\det \boldsymbol{\gamma} = \frac{1}{4}\Delta\omega^2 I_R(\omega_i)I_L(\omega_j) \left| n_R(\omega_i)\tilde{A}_k(i\omega_i) - n_L(\omega_j)\tilde{A}_{-k}^*(i\omega_j) \right|^2 \times t^2}. \quad (\text{B.82})$$

En la Ec. (B.82) vemos que $\det \boldsymbol{\gamma}$ se anula para temperaturas iguales a cero, que antes en la Ec. (B.78) no sucedía. Además, para bandas conectadas por procesos no resonantes, $\det \boldsymbol{\gamma} < 0$, mientras que para bandas conectadas por procesos resonantes, $\det \boldsymbol{\gamma} > 0$. Ésto ya nos indica que éstas últimas no van a estar entrelazadas.

B.4 Autovalores simplécticos

Como vimos en la **Sección 4.2**, para calcular las distintas medidas de correlaciones necesitamos los autovalores simplécticos de $\boldsymbol{\sigma}_{\text{av}}$ y $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{av}}$, la matriz de covariancia normal y la matriz de covariancia correspondiente al operador densidad traspuesto parcialmente, respectivamente. Estos autovalores se calculan como:

$$\lambda_{\pm} = \sqrt{\frac{\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 - 4 \det \boldsymbol{\sigma}_{\text{av}}}}{2}}, \quad (\text{B.83})$$

y

$$\tilde{\lambda}_{\pm} = \sqrt{\frac{\tilde{\Delta} \pm \sqrt{\tilde{\Delta}^2 - 4 \det \boldsymbol{\sigma}_{av}}}{2}}, \quad (\text{B.84})$$

con $\Delta = \det \boldsymbol{\alpha}_{av} + \det \boldsymbol{\beta}_{av} + 2 \det \boldsymbol{\gamma}_{av}$ y $\tilde{\Delta} = \det \boldsymbol{\alpha}_{av} + \det \boldsymbol{\beta}_{av} - 2 \det \boldsymbol{\gamma}_{av}$. Debido a que todas las matrices involucradas tienen una forma particularmente simple, podemos usar varias propiedades para calcular el determinante de $\boldsymbol{\sigma}_{av}$. Para comenzar, como $\boldsymbol{\beta}_{av}$ y $\boldsymbol{\gamma}_{av}$ conmutan, vale que

$$\det \boldsymbol{\sigma}_{av} = \det(\boldsymbol{\alpha}_{av} \boldsymbol{\beta}_{av} - \boldsymbol{\gamma}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av}^T). \quad (\text{B.85})$$

Además, como $\boldsymbol{\alpha}_{av}$, $\boldsymbol{\beta}_{av}$ y $\boldsymbol{\gamma}_{av}$ son de dimensión 2×2 ,

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{\alpha}_{av} \boldsymbol{\beta}_{av} - \boldsymbol{\gamma}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av}^T) &= \\ \det(\boldsymbol{\alpha}_{av} \boldsymbol{\beta}_{av}) + \det(\boldsymbol{\gamma}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av}^T) - \text{tr}(\boldsymbol{\alpha}_{av} \boldsymbol{\beta}_{av}) \text{tr}(\boldsymbol{\gamma}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av}^T) + \text{tr}(\boldsymbol{\alpha}_{av} \boldsymbol{\beta}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av}^T). \end{aligned} \quad (\text{B.86})$$

Usando que $\boldsymbol{\alpha}_{av} = \alpha_{av} \mathbb{1}$ y $\boldsymbol{\beta}_{av} = \beta_{av} \mathbb{1}$, podemos escribir la ecuación anterior como

$$\det(\boldsymbol{\alpha}_{av} \boldsymbol{\beta}_{av} - \boldsymbol{\gamma}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av}^T) = \det(\boldsymbol{\alpha}_{av}) \det(\boldsymbol{\beta}_{av}) + \det(\boldsymbol{\gamma}_{av})^2 - \sqrt{\det(\boldsymbol{\alpha}_{av}) \det(\boldsymbol{\beta}_{av})} \text{tr}(\boldsymbol{\gamma}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av}^T). \quad (\text{B.87})$$

Notar que en los casos resonante y no resonante vale que $\text{tr}(\boldsymbol{\gamma}_{av} \boldsymbol{\gamma}_{av}^T) = 2 |\det(\boldsymbol{\gamma}_{av})|$. Entonces, llegamos a la expresión final

$$\boxed{\det \boldsymbol{\sigma}_{av} = \det(\boldsymbol{\alpha}_{av}) \det(\boldsymbol{\beta}_{av}) + \det(\boldsymbol{\gamma}_{av})^2 - 2 \sqrt{\det(\boldsymbol{\alpha}_{av}) \det(\boldsymbol{\beta}_{av})} |\det(\boldsymbol{\gamma}_{av})|}. \quad (\text{B.88})$$

Ahora continuamos con el cálculo de los autovalores. Vamos a empezar con los de $\boldsymbol{\sigma}_{av}$ (es decir, los de la Ec. (B.83)) y luego continuaremos con los de $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{av}$. Lo primero que necesitamos es $\Delta^2 - 4 \det \boldsymbol{\sigma}_{av}$:

$$\begin{aligned} \Delta^2 - 4 \det \boldsymbol{\sigma}_{av} &= (\det \boldsymbol{\alpha}_{av} - \det \boldsymbol{\beta}_{av})^2 + 4 [\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{av}} + \text{sgn}(\det \boldsymbol{\gamma}_{av}) \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{av}}]^2 \det \boldsymbol{\gamma}_{av} \\ &= (\det \boldsymbol{\alpha}_{av} - \det \boldsymbol{\beta}_{av})^2 \left\{ 1 + \frac{4 \det \boldsymbol{\gamma}_{av}}{[\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{av}} - \text{sgn}(\det \boldsymbol{\gamma}_{av}) \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{av}}]^2} \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.89})$$

donde $\text{sgn}(x)$ es la función signo de x , que vale uno cuando $x > 0$ y menos uno si $x < 0$. Al tomar la raíz cuadrada de la Ec. (B.89) vamos a hacer una expansión de Taylor a primer orden en el factor entre corchetes para así obtener

$$\sqrt{\Delta^2 - 4 \det \boldsymbol{\sigma}_{av}} \simeq \det \boldsymbol{\alpha}_{av} - \det \boldsymbol{\beta}_{av} + 2 \frac{\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{av}} + \text{sgn}(\det \boldsymbol{\gamma}_{av}) \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{av}}}{\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{av}} - \text{sgn}(\det \boldsymbol{\gamma}_{av}) \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{av}}} \det \boldsymbol{\gamma}_{av}. \quad (\text{B.90})$$

(recordar que estamos trabajando a primer orden no trivial en γ_0). Arriba suposimos, sin pérdida de generalidad, que $\det \boldsymbol{\alpha}_{av} > \det \boldsymbol{\beta}_{av}$. En el caso en el que $\text{sgn}(\det \boldsymbol{\gamma}_{av}) = -1$ (es decir, el caso no resonante), es claro que

$$\frac{4 \det \boldsymbol{\gamma}_{av}}{[\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{av}} + \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{av}}]^2} \ll 1 \quad (\text{B.91})$$

y la expansión de Taylor a primer orden está justificada. En el otro caso en el que $\text{sgn}(\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}) = 1$ (es decir, el resonante), también sucede que

$$\frac{4\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{[\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}]^2} \ll 1 \quad (\text{B.92})$$

pero no es obvio. Vamos a continuar con el cálculo de los autovalores y demostraremos que esto es efectivamente así más adelante. Un cómputo directo nos conduce a

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm}^2 &\simeq \frac{1}{2}(1 \pm 1)\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}} + \frac{1}{2}(1 \mp 1)\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}} \\ &+ \frac{(1 \pm 1)\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - (1 \mp 1)\text{sgn}(\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}})\sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}}{\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \text{sgn}(\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}})\sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}} \det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}. \end{aligned} \quad (\text{B.93})$$

Finalmente, luego de otra expansión de Taylor a primer, orden obtenemos los autovalores para el caso no resonante

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= \sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \frac{\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}} \\ \lambda_- &= \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}} + \frac{\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}} \end{aligned} \quad (\text{B.94})$$

y para el resonante,

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= \sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \frac{\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}} \\ \lambda_- &= \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}} - \frac{\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}}. \end{aligned} \quad (\text{B.95})$$

Ahora seguimos con los autovalores simplécticos de $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{av}}$. De hecho solo necesitamos uno de ellos,

$$\tilde{\lambda}_- = \sqrt{\frac{\tilde{\Delta} - \sqrt{\tilde{\Delta}^2 - 4\det \boldsymbol{\sigma}_{\text{av}}}}{2}}, \quad (\text{B.96})$$

y solo para el caso no resonante. Luego, tenemos

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}^2 - 4\det \boldsymbol{\sigma}_{\text{av}} &= (\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}} - \det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}})^2 + 4[\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}]^2 |\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}| \\ &= 4[\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}]^2 |\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}| \left[1 + \frac{(\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}})^2}{4|\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}|} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.97})$$

donde ahora sacamos el otro sumando de factor común pues en este caso (el no resonante) ya no es cierto que

$$\frac{4\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{[\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}]^2} \ll 1. \quad (\text{B.98})$$

Continuando como en los cálculos anteriores, llegamos a que

$$\tilde{\lambda}_-^2 \simeq \frac{1}{2}(\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}} + \det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}) \left(1 - \frac{\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}}{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}} + \det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}} \sqrt{|\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}|} \right). \quad (\text{B.99})$$

Para finalizar esta sección, veamos que efectivamente sucede que

$$\frac{4\det\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{[\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}]^2} \ll 1 \quad (\text{B.100})$$

para el caso resonante. Para ello, vamos a probar la desigualdad mostrada en la Ec. (4.50):

$$|\Gamma_-(t)| \leq \frac{1}{\mu_i\mu_j}(1-\mu_i)(1-\mu_j). \quad (\text{B.101})$$

Analizando las expresiones de $\Gamma_-(t)$ y μ_i y μ_j , vemos que el lado izquierdo de la desigualdad es de orden $\gamma_0^2 n(\omega)^2$, mientras que el lado derecho es de orden $n(\omega)^2 + \gamma_0^2 n(\omega)^2$. Éste último es mucho mayor que el anterior en el límite de acoplamiento débil, por lo que la desigualdad vale siempre: cuando la temperatura es igual a cero, ambos lados tienden a cero (pero el izquierdo más rápido que el derecho), y a medida que la temperatura aumenta el lado derecho se mantiene siempre mayor al izquierdo. A simple viste se puede ver que para el caso no resonante, esa desigualdad no es válida. Utilizando la Ec. (B.101) podemos escribir

$$\frac{4\det\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{[\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}]^2} \leq \frac{(2\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - 1)(2\sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}} - 1)}{[\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}]^2}. \quad (\text{B.102})$$

Ahora llamamos $\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} = 1/2 + a$ y $\sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}} = 1/2 + b$ y reemplazando, llegamos a

$$\frac{4\det\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{[\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} - \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}]^2} \ll 1 \quad \Leftrightarrow \quad 3\frac{b}{a} \ll 1 + \left(\frac{b}{a}\right)^2, \quad (\text{B.103})$$

que, debido a la relación entre a y b en el caso resonante, vale siempre.

B.5 Medidas de correlación

Con los autovalores simplécticos ya calculados, podemos ver cómo se escriben las diferentes medidas de correlación. Empezamos por la información mutua, que está dada por

$$\mathcal{I}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{av}}) = f(\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}}) + f(\sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}) - f(\lambda_+) - f(\lambda_-), \quad (\text{B.104})$$

donde $f(x) = (x + 1/2)\ln(x + 1/2) - (x - 1/2)\ln(x - 1/2)$. Para el caso no resonante tenemos

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= \sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \frac{\det\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}} \\ \lambda_- &= \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}} + \frac{\det\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}}, \end{aligned} \quad (\text{B.105})$$

por lo que podemos aproximar, mediante un polinomio de Taylor de orden uno,

$$\begin{aligned} f(\lambda_+) &\simeq f(\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}}) + f'(\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}}) \frac{\det\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}} \\ f(\lambda_-) &\simeq f(\sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}) + f'(\sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}) \frac{\det\boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}}{\sqrt{\det\boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}} + \sqrt{\det\boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}}, \end{aligned} \quad (\text{B.106})$$

donde f' es la derivada de f :

$$f'(x) = \ln \left(\frac{x+1/2}{x-1/2} \right). \quad (\text{B.107})$$

Entonces, tenemos

$$\mathcal{I}_+(\sigma_{\text{av}}) \simeq - \left[f'(\sqrt{\det \alpha_{\text{av}}}) + f'(\sqrt{\det \beta_{\text{av}}}) \right] \frac{\det \gamma_{\text{av}}}{\sqrt{\det \alpha_{\text{av}}} + \sqrt{\det \beta_{\text{av}}}}. \quad (\text{B.108})$$

Para el caso resonante, la cuenta es análoga pero usando que

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= \sqrt{\det \alpha_{\text{av}}} + \frac{\det \gamma_{\text{av}}}{\sqrt{\det \alpha_{\text{av}}} - \sqrt{\det \beta_{\text{av}}}} \\ \lambda_- &= \sqrt{\det \beta_{\text{av}}} - \frac{\det \gamma_{\text{av}}}{\sqrt{\det \alpha_{\text{av}}} - \sqrt{\det \beta_{\text{av}}}}. \end{aligned} \quad (\text{B.109})$$

Ésto nos conduce a

$$\mathcal{I}_-(\sigma_{\text{av}}) \simeq - \left[f'(\sqrt{\det \alpha_{\text{av}}}) - f'(\sqrt{\det \beta_{\text{av}}}) \right] \frac{\det \gamma_{\text{av}}}{\sqrt{\det \alpha_{\text{av}}} - \sqrt{\det \beta_{\text{av}}}}. \quad (\text{B.110})$$

Reemplazando f' y los determinantes de las matrices correspondientes por sus valores calculados anteriormente, llegamos a la Ec. (4.48) mostrada en el texto principal. La discordia cuántica está dada por

$$\overline{D}(\sigma_{\text{av}}) = f(\sqrt{\det \beta_{\text{av}}}) - f(\lambda_+) - f(\lambda_-) + f(\sqrt{E_{\text{mín}}}), \quad (\text{B.111})$$

donde

$$E_{\text{mín}} = \begin{cases} \frac{2C^2 + (1/4 - B)(A - 4D) + 2|C|\sqrt{C^2 + (1/4 - B)(A - 4D)}}{4(1/4 - B)^2} & (D - AB)^2 \leq (1/4 + B)C^2(A + 4D) \\ \frac{AB - C^2 + D - \sqrt{C^4 + (D - AB)^2 - 2C^2(AB + D)}}{2B} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (\text{B.112})$$

Arriba usamos la notación estándar $A = \det \alpha_{\text{av}}$, $B = \det \beta_{\text{av}}$, $C = \det \gamma_{\text{av}}$ y $D = \det \sigma_{\text{av}}$. Entonces, tenemos que ver en cuál de los dos casos estamos. Usando esta misma notación es sencillo ver que podemos escribir

$$(D - AB)^2 - (1/4 + B)C^2(A + 4D) = - \left\{ (4B - 1)[(\sqrt{AB} - |C|)^2 - A/4] + C^2 \right\} C^2. \quad (\text{B.113})$$

Usando que $A, B \geq 1/4$, y que estamos trabajando a primer orden no trivial en γ_0 , vemos que la expresión entre corchetes es positiva. Por lo tanto, estamos en el caso en que

$$E_{\text{mín}} = \frac{2C^2 + (1/4 - B)(A - 4D) + 2|C|\sqrt{C^2 + (1/4 - B)(A - 4D)}}{4(1/4 - B)^2}. \quad (\text{B.114})$$

Completando cuadrados y usando la expresión para D calculada anteriormente podemos escribir

$$E_{\text{mín}} = \left(\sqrt{\det \alpha_{\text{av}}} - \frac{|\det \gamma_{\text{av}}|}{1/2 + \sqrt{\det \beta_{\text{av}}}} \right)^2, \quad (\text{B.115})$$

por lo que

$$f(\sqrt{E_{\text{mín}}}) \simeq f(\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}}) + f'(\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}}) \frac{|\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}|}{1/2 + \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}} \quad (\text{B.116})$$

y, en consecuencia, obtenemos para la discordia cuántica

$$\boxed{\bar{D}_{\pm}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{av}}) \simeq \mathcal{I}_{\pm}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{av}}) - f'(\sqrt{\det \boldsymbol{\alpha}_{\text{av}}}) \frac{|\det \boldsymbol{\gamma}_{\text{av}}|}{1/2 + \sqrt{\det \boldsymbol{\beta}_{\text{av}}}}}. \quad (\text{B.117})$$

Para la negatividad logarítmica basta tomar la Ec. (B.99), calcular $-\ln(2\tilde{\lambda}_2) = -\ln(4\tilde{\lambda}_2^2)/2$ y usar que $\ln(1+x) \simeq x$ para $x \ll 1$.

Bibliografía

- [1] M. Nielsen y I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2010.
- [2] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel, y H. Zbinden, *Quantum cryptography*. Reviews of Modern Physics 74(1), 145, 2002.
- [3] V. Giovannetti, S. Lloyd, y L. Maccone, *Advances in quantum metrology*. Nature Photonics 5, 222–229, 2011.
- [4] H. T. Quan, Y. Liu, C. P. Sun, y F. Nori, *Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines*. Physical Review E, 76(3):031105, 2007.
- [5] S. Carnot, *Réflexions sur la puissance motrice du feu et sur les machines propres a développer cette puissance*. Chez Bachelier, 1824.
- [6] bp, *Statistical Review of World Energy*, 2022.
- [7] IEA, *Energy Technology Perspectives*, 2020.
- [8] P. Pietzonka y U. Seifert, *Universal Trade-Off between Power, Efficiency, and Constancy in Steady-State Heat Engines*. Physical Review Letters, 120(19):190602, 2018.
- [9] V. Holubec y A. Ryabov, *Cycling Tames Power Fluctuations near Optimum Efficiency*. Physical Review Letters, 121(12):120601, 2018.
- [10] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Wiley, 1991.
- [11] F. L. Curzon y B. Ahlborn, *Efficiency of a Carnot engine at maximum power output*. American Journal of Physics, 43(1):22, 1975.
- [12] S. Vinjanampathy y J. Anders, *Quantum thermodynamics*. Contemporary Physics, 57(4), 2016.
- [13] J. Goold, M. Huber, A. Riera, L. del Rio, y P. Skrzypczyk, *The role of quantum information in thermodynamics—a topical review*. Journal of Physics A, 49:143001, 2016.
- [14] P. Talkner y P. Hänggi, *Colloquium: Statistical mechanics and thermodynamics at strong coupling: Quantum and classical*. Reviews of Modern Physics, 94(4):041002, 2020.
- [15] E. Geva y R. Kosloff, *A quantum-mechanical heat engine operating in finite time. A model consisting of spin-1/2 systems as the working fluid*. The Journal of Chemical Physics, 96(4):3054, 1992.

- [16] E. Geva y R. Kosloff, *Three-level quantum amplifier as a heat engine: A study in finite-time thermodynamics*. Physical Review E, 49(5):3903, 1994.
- [17] D. Gelbwaser-Klimovsky, R. Alicki, y G. Kurizki, *Minimal universal quantum heat machine*. Physical Review E, 87(1):012140 2013.
- [18] O. Abah, J. Roßnagel, G. Jacob, S. Deffner, F. Schmidt-Kaler, K. Singer, y E. Lutz, *Single-Ion Heat Engine at Maximum Power*. Physical Review Letters, 109(20):203006, 2012.
- [19] O. Abah y E. Lutz *Efficiency of heat engines coupled to nonequilibrium reservoirs*. Europhysics Letters, 106:20001, 2014.
- [20] J. Roßnagel, O. Abah, F. Schmidt-Kaler, K. Singer, y E. Lutz *Nanoscale Heat Engine Beyond the Carnot Limit*. Physical Review Letters, 112(3):030602, 2014.
- [21] C. Elouard, D. Herrera-Martí, B. Huard, y A. Auffèves, *Extracting Work from Quantum Measurement in Maxwell's Demon Engines*. Physical Review Letters, 118(26):260603, 2017.
- [22] L. Bresque, P. Camati, S. Rogers, K. Murch, A. Jordan, y Alexia Auffèves, *Two-Qubit Engine Fueled by Entanglement and Local Measurements* Physical Review Letters, 126(12):120605, 2021.
- [23] M. Scully, M. Suhail Zubairy, G. Agarwal, y H. Walther, *Extracting Work from a Single Heat Bath via Vanishing Quantum Coherence*. Science, 299(5608), 2003.
- [24] A. Hewgill, A. Ferraro, y G. De Chiara, *Quantum correlations and thermodynamic performances of two-qubit engines with local and common baths*. Physical Review A, 98(4):042102 2018.
- [25] J. P. Gordon, H. J. Zeiger, y C. H. Townes, *The Maser—New Type of Microwave Amplifier, Frequency Standard, and Spectrometer*. Physical Review, 99(4):1264, 1955.
- [26] H. E. D. Scovil y E. O. Schulz-DuBois, *Three-Level Masers as Heat Engines*. Physical Review Letters, 2(6):262, 1959.
- [27] J. Roßnagel, S. Dawkins, K. Tolazzi, O. Abah, E. Lutz, F. Schmidt-Kaler, y K. Singer *A single-atom heat engine*. Science, 352(6283), 2016.
- [28] J. Roßnagel, *A single-atom heat engine*. Tesis presentada para optar por el título de Doctor en Ciencias de la Universidad Johannes Gutenberg de Mainz, 2016.
- [29] D. von Lindenfels, O. Gräß, C. Schmiegelow, V. Kaushal, J. Schulz, M. Mitchison, J. Gould, F. Schmidt-Kaler, y U. Poschinger, *Spin Heat Engine Coupled to a Harmonic Oscillator Flywheel*. Physical Review Letters, 123(8):080602, 2019.
- [30] J. Klaers, S. Faelt, A. Imamoglu, y E. Togan, *Squeezed Thermal Reservoirs as a Resource for a Nanomechanical Engine beyond the Carnot Limit*. Physical Review X, 7(3):031044, 2017.

- [31] R. de Assis, T. de Mendonça, C. Villas-Boas, A. de Souza, R. Sarthour, I. Oliveira, y N. de Almeida, *Efficiency of a Quantum Otto Heat Engine Operating under a Reservoir at Effective Negative Temperatures*. Physical Review Letters, 122(24):240602, 2019.
- [32] J. Peterson, T. Batalhão, M. Herrera, A. Souza, R. Sarthour, I. Oliveira, y R. Serra, *Experimental Characterization of a Spin Quantum Heat Engine*. Physical Review Letters, 123(24):240601, 2019.
- [33] S. Hernández-Gómez y N. Fabbri, *Quantum Control for Nanoscale Spectroscopy With Diamond Nitrogen-Vacancy Centers: A Short Review*. Frontiers in Physics, 8, 2021.
- [34] J. Klatzow, J. Becker, P. Ledingham, C. Weinzetl, K. Kaczmarek, D. Saunders, J. Nunn, I. Walmsley, R. Uzdin, y E. Poem, *Experimental Demonstration of Quantum Effects in the Operation of Microscopic Heat Engines*. Physical Review Letters, 122(11):110601, 2019.
- [35] J.P. Brantut, C. Grenier, J. Meineke, D. Stadler, S. Krinner, C. Kollath, T. Esslinger, y A. Georges, *A Thermoelectric Heat Engine with Ultracold Atoms*. Science, 342(6159), 2013.
- [36] K. Ono, S. N. Shevchenko, T. Mori, S. Moriyama, y F. Nori, *Analog of a Quantum Heat Engine Using a Single-Spin Qubit*. Physical Review Letters, 125(16):166802, 2020.
- [37] E. Geva y R. Kosloff, *On the classical limit of quantum thermodynamics in finite time*. Journal of Chemical Physics, 97(6):4398, 1992.
- [38] H. T. Quan, P. Zhang, y C. P. Sun, *Quantum heat engine with multilevel quantum systems*. Physical Review E, 72(5):056110, 2005.
- [39] R. Alicki y D. Gelbwaser-Klimovsky, *Non-equilibrium quantum heat machines*. New Journal of Physics, 17:115012, 2015.
- [40] J. Son, P. Talkner, y J. Thingna, *Monitoring Quantum Otto Engines*. PRX Quantum, 2(4).040328, 2021.
- [41] M. Aguilar y J. P. Paz, *General theory for thermal and nonthermal quantum linear engines*. Physical Review A, 105(4):042219, 2022.
- [42] M. Aguilar, N. Freitas, y J. P. Paz, *Entanglement generation in quantum thermal machines*. Physical Review A, 102(6):062422, 2020.
- [43] M. Aguilar y J. P. Paz, *Time-extensive classical and quantum correlations in thermal machines*. Physical Review A, 105(1):012410, 2022.
- [44] A. Caldeira y A. Leggett, *Path integral approach to quantum Brownian motion*. Physica A, 121(3), 1983.
- [45] B. L. Hu, J.P. Paz, y Y. Zhang, *Quantum Brownian motion in a general environment: Exact master equation with nonlocal dissipation and colored noise*. Physical Review D, 25(8):2843, 1992.
- [46] E. Martinez y J. P. Paz, *Dynamics and Thermodynamics of Linear Quantum Open Systems*. Physical Review Letters, 110(13):130406, 2013.

- [47] N. Freitas y J. P. Paz, *Fundamental limits for cooling of linear quantum refrigerators*. Physical Review E, 95(1):012146, 2017.
- [48] N. Freitas y J. P. Paz, *Cooling a quantum oscillator: A useful analogy to understand laser cooling as a thermodynamical process*. Physical Review A, 97(3):032104, 2018.
- [49] R. Alicki, *The quantum open system as a model of the heat engine*. Journal of Physics A, 12(5):L103, 1979.
- [50] H. Leitch, N. Piccione, B. Bellomo, y G. De Chiara, *Driven quantum harmonic oscillators: A working medium for thermal machines*. AVS Quantum Sci. 4(1):012001, 2022.
- [51] R. Alicki, D. Gelbwaser-Klimovsky, y G. Kurizki, *Periodically driven quantum open systems: Tutorial*. arXiv:1205.4552, 2012.
- [52] R. Alicki y D. Gelbwaser-Klimovsky, *Non-equilibrium quantum heat machines*. New Journal of Physics, 17:115012, 2015.
- [53] Ti-Wei Xue y Zeng-Yuan Guo, *What Is the Real Clausius Statement of the Second Law of Thermodynamics?*. Entropy, 21(10):926, 2019.
- [54] M. Campisi, *Fluctuation relation for quantum heat engines and refrigerators*. Journal of Physics A, 47:245001, 2014.
- [55] M. Campisi, J. Pekola, y R. Fazio, *Nonequilibrium fluctuations in quantum heat engines: theory, example, and possible solid state experiments*. New Journal of Physics, 17:035012, 2015.
- [56] S. Watanabe, *Information Theoretical Analysis of Multivariate Correlation*. IBM Journal of Research and Development, 4(1), 1960.
- [57] A. Serafini, F. Illuminati, y S. De Siena, *Symplectic invariants, entropic measures and correlations of Gaussian states*. Journal of Physics B, 37(2), 2003.
- [58] G. Adesso, D. Girolami, y A. Serafini, *Measuring Gaussian Quantum Information and Correlations Using the Rényi Entropy of Order 2*. Physical Review Letters, 109(19):190502, 2012.
- [59] G. Adesso, A. Ragy, y A. Lee, *Continuous Variable Quantum Information: Gaussian States and Beyond*. Open Systems & Information Dynamics, 21(01n02):1440001, 2014.
- [60] H. Araki y E. Lieb, *Entropy inequalities*. Communications in Mathematical Physics, 18, 160-170, 1970.
- [61] H. Ollivier y W. Zurek, *Quantum Discord: A Measure of the Quantumness of Correlations*. Physical Review Letters, 88(1):017901, 2001.
- [62] L. Henderson y V. Vedral, *Classical, quantum and total correlations*. Journal of Physics A, 34:6899, 2001.
- [63] E. Knill y R. Laflamme, *Power of One Bit of Quantum Information*. Physical Review Letters, 81(25):5672, 1998.

- [64] C. Bennett, D. DiVincenzo, C. Fuchs, T. Mor, E. Rains, P. Shor, J. Smolin, y W. Wootters, *Quantum nonlocality without entanglement*. Physical Review A., 59(2):1070, 1999.
- [65] M. Horodecki, A. Sen(De), U. Sen, y K. Horodecki, *Local Indistinguishability: More Non-locality with Less Entanglement*. Physical Review Letters, 90(4):047902, 2003.
- [66] A. Ferraro, L. Aolita, D. Cavalcanti, F. Cucchietti, y A. Acín, *Almost all quantum states have nonclassical correlations*. Physical Review A., 81(5):052378, 2010.
- [67] A. Datta, A. Shaji, y C. Caves, *Quantum Discord and the Power of One Qubit*. Physical Review Letters, 100(5):050502, 2008.
- [68] C. Rodríguez-Rosario, K. Modi, A. Kuah, A. Shaji, y E. Sudarshan, *Completely positive maps and classical correlations*. Journal of Physics A, 41:205301, 2008.
- [69] M. Piani, P. Horodecki, y R. Horodecki, *No-Local-Broadcasting Theorem for Multipartite Quantum Correlations*. Physical Review Letters, 100(9):090502, 2008.
- [70] B. Lanyon, M. Barbieri, M. Almeida, y A. White, *Experimental Quantum Computing without Entanglement*. Physical Review Letters, 101(9):200501, 2008.
- [71] N. Freitas N. y J.P. Paz, *Dynamics of Gaussian discord between two oscillators interacting with a common environment*. Physical Review A, 85(3):032118, 2012.
- [72] P. Giorda y M. Paris, *Gaussian Quantum Discord*. Physical Review Letters, 105(2):020503, 2010.
- [73] G. Adesso y A. Datta, *Quantum versus classical correlations in Gaussian states*. Physical Review Letters, 105(3):030501, 2010.
- [74] S. Pirandola, G. Spedalieri, S. Braunstein, N. Cerf, y S. Lloyd, *Optimality of Gaussian Discord*. Physical Review Letters, 113(14):140405, 2014.
- [75] A. Peres, *Separability Criterion for Density Matrices*. Physical Review Letters, 77(8):1413, 1996.
- [76] M. Horodecki, P. Horodecki, y R. Horodecki, *Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions*. Physics Letters A, 223, 1996.
- [77] G. Adesso y F. Illuminati, *Gaussian measures of entanglement versus negativities: Ordering of two-mode Gaussian states*. Physical Review A, 72(3):032334, 2005.
- [78] K. Audenaert, M. B. Plenio, y J. Eisert, *Entanglement Cost under Positive-Partial-Transpose-Preserving Operations*. Physical Review Letters, 90(2):027901, 2003.