

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE MATERIALES



TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

Termostatos colisionales y transporte de calor en sistemas cuánticos
unidimensionales

Collisional thermostats and heat transport in one-dimensional quantum systems

Nelson Elías Rivas Chacón

Supervisores: Juan Manuel Rodríguez Parrondo y Juan José Mazo Torres

Máster Universitario en Nanofísica y Materiales Avanzados

Curso académico 2024/2025

Convocatoria ordinaria

CALIFICACIÓN OBTENIDA : SOBRESALIENTE

Termostatos colisionales y transporte de calor en sistemas cuánticos unidimensionales

Nelson Elías Rivas Chacón

Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

El entendimiento y control del transporte de calor en la escala nanométrica sigue siendo uno de los grandes desafíos de la nanofísica. En este trabajo analizamos cadenas cuánticas unidimensionales de espines $S = 1/2$ acopladas a termostatos colisionales autónomos. Mediante simulaciones numéricas verificamos la correcta termalización tanto de espines individuales como de cadenas finitas, y estudiamos el transporte de calor en presencia de gradientes térmicos. Observamos un comportamiento superdifusivo incluso en configuraciones donde se espera transporte balístico, lo que evidencia el impacto del modelado del entorno en la dinámica del sistema. Estos resultados refuerzan el potencial de los termostatos colisionales como herramienta analítica y versátil para el estudio de sistemas cuánticos abiertos fuera de equilibrio.

I. INTRODUCCIÓN

El entendimiento y control del transporte de calor en la escala nanométrica se mantiene hasta el día de hoy como uno de los grandes retos pendientes de la nanofísica. En la escala macroscópica, la *ley de Fourier*

$$\dot{Q} = -k\nabla T \quad (1)$$

describe de forma precisa este fenómeno en sólidos, donde \dot{Q} representa la cantidad de calor transportada por unidad de superficie y tiempo, que es proporcional al gradiente térmico ∇T a través del tensor k , comúnmente conocido como la conductividad térmica. Se supone que la ec. (1) es válida cerca del equilibrio, pues solo dentro de esta suposición tienen sentido las definiciones de flujo de calor \dot{Q} y de temperatura $T(\mathbf{r})$.

A pesar de la utilidad de esta ley, su carácter fenomenológico no ha pasado por alto desde su concepción en 1808. Desde los estudios pioneros de Peierls sobre fonones en cristales macroscópicos [1], se han descubierto fenómenos de transporte de calor a escala nanométrica que difieren significativamente del comportamiento en materiales macroscópicos. El ejemplo más paradigmático se remonta a la década de 1950, cuando Fermi, Pasta, Ulam y Tsingou estudiaron la termalización de cadenas unidimensionales de partículas unidas por resortes anarmónicos [2]. Estas simulaciones mostraron un transporte anómalo y coherente del calor a través de ondas balísticas o superdifusivas, evitando la termalización del sistema y contrastando con el transporte incoherente y difusivo que supone la Ley de Fourier.

En el dominio cuántico el problema es considerablemente más complejo e interesante. Recientemente ha habido numerosos progresos en el entendimiento del transporte de calor en cadenas unidimensionales cuánticas de espines $S = 1/2$, debido tanto a trabajos analíticos como numéricos [3–8]. Al igual que en el dominio clásico, no existe ningún consenso sobre las condiciones necesarias para que el transporte de las excitaciones de espín sea difusivo, esto es, que exista el transporte normal de calor. La integrabilidad (i.e. que existan suficientes constantes de movimiento como para que sea resoluble analíticamente)

de esos sistemas sigue siendo conjeturada como propiedad fundamental para esta distinción [3]. Sin embargo, algunos estudios se centran en cadenas integrables con *gaps* energéticos [5] y otros proponen que la capacidad de mapear la cadena a un modelo de fermiones no interactuantes asegura la conducción anómala [6].

En general, la forma más habitual de modelar la interacción de estos sistemas con los baños térmicos responsables de mantener el gradiente de temperatura es a través de ecuaciones tipo *Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad* (GKSL) [9–11], una de las herramientas más importantes dentro de la teoría de los sistemas cuánticos abiertos, que sirve para modelar de forma relativamente sencilla la evolución de sistemas débilmente acoplados a su entorno [4–8]. Existen, sin embargo, diversas cuestiones abiertas sobre este formalismo, principalmente relacionadas con el carácter global o local de este tipo de ecuaciones maestras. Los llamados baños de *interacción repetida* o *colisionales* surgen así como una alternativa muy llamativa para abordar estos problemas gracias a la posibilidad de ser tratados analíticamente [12]. En estos modelos, el baño térmico consiste en un colectivo de unidades independientes en un estado térmico dado, generalmente el estado de equilibrio de Gibbs. En cada interacción, una de estas unidades se pone en contacto con el sistema durante un cierto intervalo de tiempo y este mismo proceso se repite indefinidamente con unidades *frescas* (i.e. su estado inicial es siempre el mismo que el del baño). Uno de los mayores inconvenientes de este modelo es la falta de autonomía del proceso. En general, es necesario un agente externo cuya acción implica un intercambio de energía que previene la termalización del sistema. Por suerte, no hace mucho se ha teorizado un esquema de interacción repetida completamente autónomo [13–16] que permite la termalización. Ahora bien, estos modelos de termostatos no han sido utilizados aún para estudiar la termalización de cadenas de espines cuánticos.

En el presente artículo se busca estudiar el transporte de calor en cadenas unidimensionales cuánticas de espines $S = 1/2$ acopladas en sus extremos a termostatos colisionales. El manuscrito se organiza de la siguiente forma.

En la Sección II se describen los modelos teóricos, tanto de los termostatos (Subsección II A) como de la cadena de espines (Subsección II B). La Sección III contiene los resultados más importantes de la investigación. En ella se muestran los procesos de termalización de un único espín (Subsección III A) y de cadenas de espines acopladas a uno o dos termostatos (Subsección III B). Finalmente, en la Sección IV se presentan las principales conclusiones.

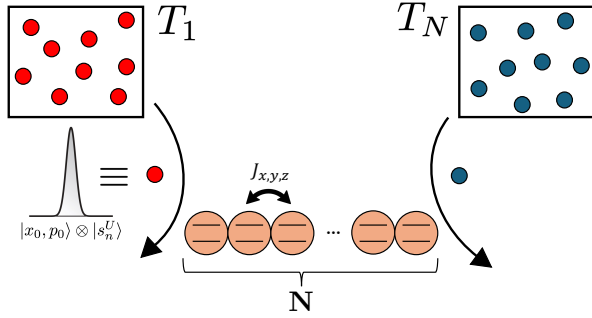


Figura 1. Esquema del modelo. Una cadena de qubits interactuantes es bombardeada en sus extremos con unidades provenientes de baños térmicos a una determinada temperatura. Las unidades se modelan como partículas cuya parte espacial se corresponde con paquetes de onda estrechos y con el estado interno de un qubit.

II. MODELOS TEÓRICOS Y MÉTODOS DE SIMULACIÓN

A. Termostatos colisionales

Modelaremos los termostatos colisionales siguiendo lo descrito en la ref. [16]. Dentro del esquema de interacción repetida, consideraremos un ensamblaje de unidades independientes, cada una con grados de libertad internos y espaciales, moviéndose en una dimensión y que interactúan una a una con el sistema (i.e. la cadena de espines). El Hamiltoniano que describe el proceso viene dado por:

$$H_{\text{total}} = H_S + \frac{\hat{p}^2}{2m} + H_U + \chi_L(\hat{x})H_{US} \quad (2)$$

donde m es la masa de la unidad, \hat{p} y \hat{x} son sus operadores de momento y posición y la función χ_L delimita la región L en la cual la unidad y el sistema interactúan a través del Hamiltoniano H_{US} . Fuera de esta región, el Hamiltoniano $H_0 = H_S + H_U$ describe la evolución de los grados de libertad internos a través del Hamiltoniano del sistema H_S y el de los grados de libertad internos de la unidad H_U . Dentro de la región de interacción, los estados internos del complejo se ven afectados por el Hamiltoniano $H = H_{US} + H_0$.

El efecto de la colisión en el sistema viene dado por un mapa CPTP (*completely positive trace preserving*) [17]

que relaciona los estados internos antes (ρ) y después (ρ') de la colisión. El estado espacial de las unidades, que en general serán paquetes de ondas, es de fundamental importancia para la evolución de ρ . Si bombardeamos el sistema con un flujo de unidades descritas mediante paquetes de onda estrechos (i.e. cuya dispersión en momentos es más pequeña que el espaciado energético entre niveles más pequeño del sistema) y consideramos que H_S es no degenerado, entonces las poblaciones y coherencias se desacoplan y las últimas decaen. En la base de autoestados de H_0 , cada colisión induce la siguiente evolución en la matriz densidad total:

$$\rho'_{J',J} = \sum_J P_{J',J}(E_{p_0} + e_J) \rho_{JJ} \quad (3)$$

donde $P_{J',J}(E_{p_0} + e_J)$ son las probabilidades de transición entre los estados $|s_J\rangle$ y $|s_{J'}\rangle$ de H_0 con energías e_J y $e_{J'}$ que dependen de la energía cinética $E_{p_0} = p_0^2/(2m)$ de la unidad incidente y de la energía del estado inicial de la transición e_J . En general, estas probabilidades se descomponen como $P_{J',J}(E) = |t_{J',J}(E)|^2 + |r_{J',J}(E)|^2$ con $t_{J',J}(E)$ y $r_{J',J}(E)$ las amplitudes de transmisión y reflexión, respectivamente.

Para que el sistema termalice a una temperatura T , el estado interno de las unidades debe ser tal que estas estén en equilibrio a dicha temperatura. Esto es:

$$\rho_U(T) = \frac{1}{Z_U} \sum_n e^{-\beta e_n^U} |s_n^U\rangle \langle s_n^U| \quad (4)$$

donde $\beta = 1/T$, $Z_U = \sum_n e^{-\beta e_n^U}$ es la función de partición interna de la unidad y n recorre todos los autoestados $|s_n^U\rangle$ de H_U con energías e_n^U . Lo que es más, la distribución de momentos de estas unidades debe estar dada por:

$$\mu(p, \beta) = \frac{\beta p}{m} e^{-\beta p^2/(2m)} \quad p \in [0, \infty) \quad (5)$$

que es la distribución de efusión de velocidades, es decir, la densidad de probabilidad de la velocidad de las partículas que cruzan un punto en un gas unidimensional en equilibrio.

La manera estándar de obtener las probabilidades de transición $P_{J',J}(E_{p_0} + e_J)$ es a través del formalismo de la matriz de transferencia [18]. La forma exacta de esta matriz es engorrosa y puede ser encontrada en otro lugar [16]. Sin embargo, en el límite de altas energías (i.e. $E = E_{p_0} + e_J \gg e_J, e_{J'}$), que en principio solo es válido para unidades que incidan sobre el sistema con alta energía cinética, se pueden hacer aproximaciones que conserven la simetría y unitariedad de la matriz de transferencia exacta, simplificando así la implementación de los termostatos.

De esta aproximación se siguen dos modelos de termostatos. En ambos se toman amplitudes de reflexión nulas (i.e. $r_{J',J}(E) = 0$) y las siguientes amplitudes de transmisión:

$$t_{J',J}^X(E) = \begin{cases} e^{-iA_{J',J}^X} \langle s_{J'} | e^{-iBx} | s_J \rangle & \text{si } E > e_{\max} \\ \delta_{J',J} & \text{si } E \leq e_{\max} \end{cases} \quad (6)$$

donde $E = p_0^2/(2m) + e_J$, e_{max} es el mayor de los autovalores de H y H_0 , $\delta_{J'J}$ es la delta de Kronocker y $X \in \{\text{WVO}, \text{RIT}\}$. En el primer caso, el modelo *operador vector de onda* (WVO), se toma el factor $A_{J'J}^{\text{WVO}} = L(k_J + k_{J'})/2$ y el operador $B_{\text{WVO}} = -LK(E)$, donde $K(E) = \sqrt{2m(E - H)}$ es el operador vector de onda y k_J son los vectores de onda de los autoestados de H_0 , i.e. los autoestados del operador $K_0(E) = \sqrt{2m(E - H_0)}$. En el segundo caso, el modelo de *tiempo de interacción aleatorio* (RIT), se toma el factor $A_{J'J}^{\text{RIT}} = -\tau(E)(e_J + e_{J'})/2$ y el operador $B_{\text{RIT}} = \tau(E)H$ con $\tau(E) = L/\sqrt{2E/m}$ el tiempo que una partícula clásica con una velocidad $v_E = \sqrt{2E/m}$ tarda en atravesar la región de interacción de longitud L .

En aras de ahorrar esfuerzo computacional, optaremos por dejar de lado el componente estocástico del proceso e integraremos las probabilidades de transición junto con la distribución de efusión (5), tal que cada colisión actúe como una *colisión promedio* representativa de la temperatura T del baño:

$$P_{J'J}(\beta) = \int_0^\infty P_{J'J} \left(\frac{p_0^2}{2m} + e_J \right) \mu(p_0, \beta) dp_0 \quad (7)$$

Así, el conjunto de probabilidades promedio $\{P_{J'J}(\beta)\}$ calculadas a partir de ec. (7) y la evolución dada por la ec. (3) son suficientes para estudiar la evolución del sistema.

B. Cadenas de espines y definiciones de temperatura y flujo

Consideraremos cadenas antiferromagnéticas de N qubits (espines $S = 1/2$) descritas por el siguiente Hamiltoniano con interacciones a primeros vecinos tipo Heisenberg [3–8]:

$$H_S = \sum_i^{N-1} \left[J_x \sigma_x^S(i) \sigma_x^S(i+1) + J_y \sigma_y^S(i) \sigma_y^S(i+1) + J_z \sigma_z^S(i) \sigma_z^S(i+1) \right] + \sum_i^N \omega_S \sigma_z^S(i) \quad (8)$$

donde $\sigma_k^S(i)$ con $k \in \{x, y, z\}$ son las matrices de Pauli actuando sobre el espacio de Hilbert del espín i de la cadena, las constantes J_x, J_y y J_z (positivas) median el canje entre primeros vecinos y ω_S establece la separación energética entre los niveles de cada qubit independiente. Este Hamiltoniano nos permite estudiar los diversos tipos de canje abordados en la literatura. Esto es, canje XX ($J_x = J_y, J_z = 0$), XXX ($J_x = J_y = J_z$), XXZ ($J_x = J_y \neq J_z$) y XYZ ($J_x \neq J_y \neq J_z$). Si escribimos el Hamiltoniano (8) tal que $H_S = \sum_i^{N-1} h_{i,i+1} + \sum_i^N h_i$, donde $h_{i,i+1}$ incluye el canje entre primeros vecinos y h_i describe la evolución libre de los qubits, entonces podemos definir un Hamiltoniano local:

$$h_i^{\text{local}} = \frac{1}{2} h_{i-1,i} + h_i + \frac{1}{2} h_{i,i+1} \quad (9)$$

con $h_{0,1} = h_{N,N+1} = 0$, que nos permite estimar la temperatura local T_i de cada qubit. Definimos T_i tal que sea solución de la ecuación [6]:

$$\text{Tr} [\rho_S^{\text{eq}}(T_i) h_i^{\text{local}}] = \text{Tr} [\rho_S h_i^{\text{local}}] \quad (10)$$

donde Tr representa la traza, ρ_S es la matriz densidad del sistema en algún punto del proceso de termalización y $\rho_S^{\text{eq}}(T)$ es la matriz densidad del sistema en equilibrio térmico a una temperatura T , dada trivialmente por:

$$\rho_S^{\text{eq}}(T) = \frac{1}{Z_S} \sum_n e^{-\beta e_n^S} |s_n^S\rangle \langle s_n^S| \quad (11)$$

donde $Z_S = \sum_n e^{-\beta e_n^S}$ es la función de partición del sistema y n recorre todos los autoestados $|s_n^S\rangle$ de H_S con energías e_n^S .

Con la finalidad de comprobar la validez de la Ley de Fourier (1) será necesario calcular el flujo de calor a través de la cadena de espines. Como consecuencia de tomar paquetes de onda estrechos, todo cambio en la energía interna del sistema es debido a variaciones en el flujo de calor δQ . Así, es trivial definir este flujo como la variación de energía de la cadena tras cada colisión:

$$\delta Q = \langle H_S \rangle_f - \langle H_S \rangle_i \quad (12)$$

donde $\langle H_S \rangle = \text{Tr} [\rho_S H_S]$ y los subíndices i y f indican antes y después de la colisión, respectivamente.

Por simplicidad, consideraremos que las unidades de los baños, al igual que los espines de la cadena, son qubits. Además, su Hamiltoniano interno vendrá dado por $H_U = \omega_U \sigma_z^U$, con $2\omega_U$ la separación energética entre los niveles del qubit y σ_i^U con $i \in \{x, y, z\}$ las matrices de Pauli actuando sobre el espacio de Hilbert de las unidades.

C. Simulaciones numéricas

La implementación de los modelos anteriormente descritos se llevó a cabo en programas de Python (versión 3.10) usando paquetes estándares de cálculo numérico, destacando entre ellos el módulo de QuTIP [19]. Estos programas están a la disposición del lector a través de un repertorio de acceso libre [20].

III. RESULTADOS

A. Termalización de un único espín

En este apartado estudiaremos el caso más sencillo de termalización, en el que el sistema lo constituye un único qubit. Consideramos los siguientes Hamiltonianos libres y de interacción: $H_0 = H_U \otimes \mathbb{I}_S + \mathbb{I}_U \otimes H_S$ y $H_{US} = j_x \sigma_x^U \otimes \sigma_x^S + j_y \sigma_y^U \otimes \sigma_y^S$ donde $H_S = H_{\text{qubit}} = \omega_S \sigma_z^S$, $\mathbb{I}_{S,U}$ son las matrices unidad de cada espacio de Hilbert y $j_{x,y}$ son las constantes de acoplo entre sistema y unidades.

En primer lugar verificamos que los modelos de termostato anteriormente propuestos sean capaces de reproducir las probabilidades de transición $P_{J',J}(E_{p_0} + e_J)$ obtenidas a partir del método de transferencia exacto. En la fig. 2 se muestra la probabilidad de la transición $|00\rangle \rightarrow |11\rangle$, estados de H_0 , en función de la energía de la unidad incidente E_{p_0} . Como era de esperar, a altas energías cinéticas ambos modelos reproducen de forma precisa la probabilidad de transición exacta. Llama la atención que a bajas energías el modelo WVO muestre cierto grado de acuerdo, mientras que el modelo RIT no.

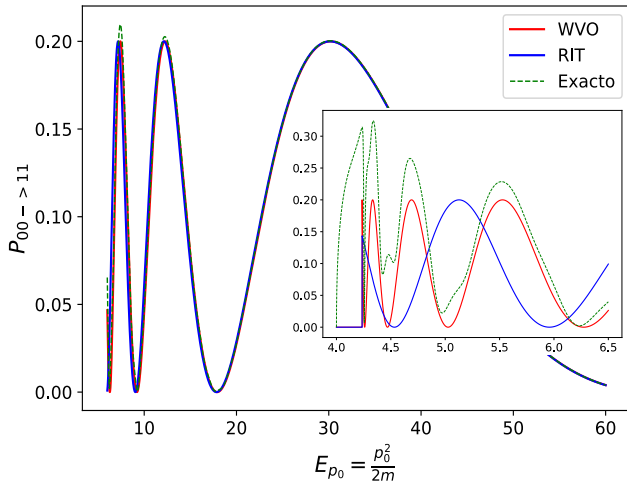


Figura 2. Probabilidad de la transición $|00\rangle \rightarrow |11\rangle$ (estados de H_0) del complejo qubit-unidad en función de la energía cinética de la partícula incidente E_{p_0} con $j_x = 1, j_y = 0, \omega_S = \omega_U = 1, m = 0,1$ y $L = 50$ calculada a partir de la matriz de transferencia exacta y los modelos WVO y RIT. El inset muestra el comportamiento para bajas energías.

A continuación, bombardeamos el sistema con paquetes de onda estrechos provenientes de un baño a temperatura T_U (i.e. su distribución de momentos (5) y estado interno (4) se siguen de dicha temperatura) y lo hacemos evolucionar a través de la ec. (3), que simula saltos entre autoestados puros de H_S , para así calcular las poblaciones de ambos niveles del qubit. Después de 10^4 colisiones promediadas, el qubit ha termalizado a la temperatura del baño, como se refleja en la fig. 3, donde se muestra la población estacionaria del estado fundamental del sistema (qubit) ρ_S^{GS} . No obstante, el estado estacionario ($T_{\text{qubit}} = T_U$) se alcanza mucho antes, tras solo 50 colisiones (ver inset de la misma figura), mostrando una de las principales ventajas de las colisiones promediadas. Cabe destacar que la ‘rapidez’ del proceso de termalización depende de la temperatura del baño (en general, a mayor T_U , más rápido termaliza), del tamaño del sistema y de las constantes de acoplo $j_{x,y}$. El estado de equilibrio es independiente de estas constantes, como era de esperar. Así, de ahora en adelante tomaremos por simplicidad $j_x = 1$ y $j_y = 0$. Además, hemos comprobado que, una vez alcanzado el estado estacionario, los resulta-

dos de ambos modelos son los mismos y por ello, a partir de ahora, se muestran solo los resultados del termostato WVO.

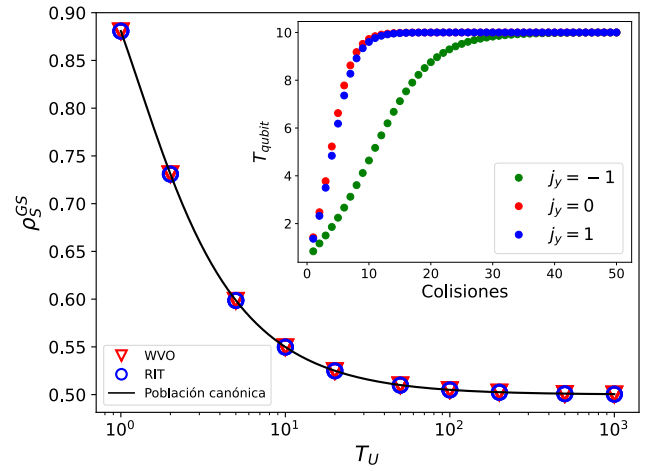


Figura 3. Termalización de un único qubit. Población estacionaria del estado fundamental del qubit ρ_S^{GS} en función de la temperatura T_U después de 10^4 colisiones con $j_x = 1, j_y = 0, \omega_S = \omega_U = 1, m = 0,1$ y $L = 50$ calculada a partir de la evolución (3) y las probabilidades promediadas (7) de los modelos WVO y RIT. Se muestra también la población canónica del nivel fundamental. El inset muestra el proceso de termalización con $j_y = 1, 0, -1$ en función del número de colisiones para $T_U = 10$. La temperatura del qubit T_{qubit} se calcula a partir de la ec. (10) tomando H_{qubit} como Hamiltoniano local. Se utiliza solo el modelo WVO.

B. Transporte de calor en cadenas de espines

Para trabajar con cadenas debemos redefinir los Hamiltonianos internos libre H_0 y de interacción H_{US} . En el caso de cadenas acopladas a un único termostato, basta con tomar H_S como el Hamiltoniano (8) y reescribir $H_{US} = j_x \sigma_x^U \otimes \sigma_x^S(1) + j_y \sigma_y^U \otimes \sigma_y^S(1)$. Así, las unidades del baño a priori solo interactúan con el espín en el extremo izquierdo de la cadena. Al haber solo un termostato, esperamos que, una vez alcanzado el estado estacionario, la cadena termalice a la temperatura T_U del mismo (i.e. $T_i = T_U \forall i$). Bombardeamos cadenas de 2-4 espines con paquetes de ondas estrechos y estudiamos su termalización para diferentes temperaturas T_U en la fig. 4a. Independientemente del modelo de interacción, las cadenas termalizan. Así, se alcanzan perfiles de temperatura planos, como se observa en el inset de la fig. 4b.

En la fig. 4b estudiamos el proceso de termalización en función del número de colisiones para una cadena de 6 espines. Debemos destacar dos factores. En primer lugar, se ve como la temperatura T_i de todos los espines aumenta de forma simultánea hasta alcanzar la temperatura del baño. En principio, y debido a la localidad de la interacción, uno espera que exista cierto retardo en la

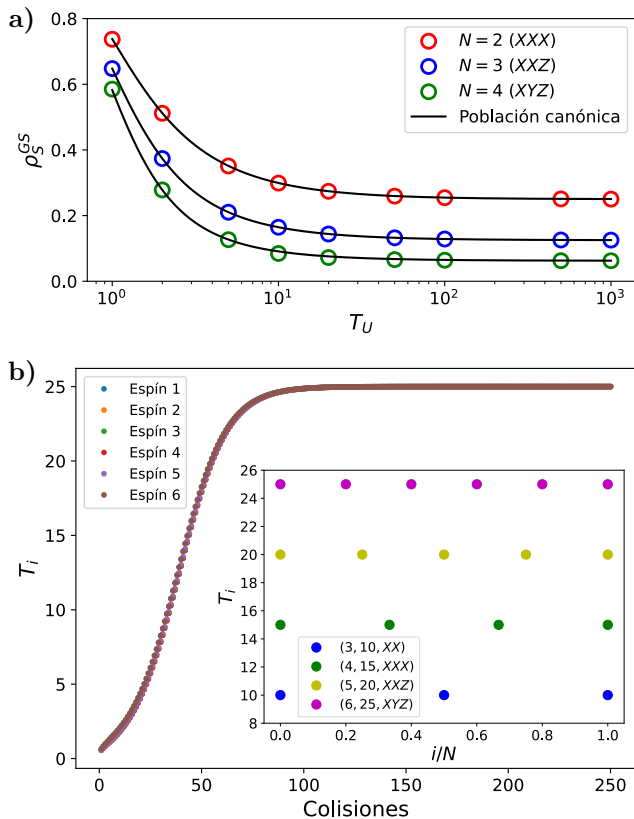


Figura 4. Cadenas acopladas a un termostato. **(a)** Población estacionaria del estado fundamental ρ_S^{GS} en función de la temperatura T_U del baño de cadenas de 2, 3 y 4 espines con interacciones del tipo XXX, XXZ y XYZ, tras 10^3 , 10^4 y 10^5 colisiones, respectivamente. **(b)** Temperatura local T_i en función del número de colisiones en una cadena de 6 espines con interacción del tipo XYZ acoplada a un baño a temperatura $T_U = 25$. El inset muestra el perfil de temperatura tras 300 colisiones de cadenas de 3, 4, 5 y 6 espines con interacciones XX, XXX, XXZ y XYZ, acopladas a baños a temperaturas $T_U = 10, 15, 20$ y 25 , respectivamente. La leyenda tiene la forma (N, T_U, canje) . En todos los casos se toma $j_x = 1, j_y = 0, \omega_S = \omega_U = 1, m = 0,1$ y $L = 50$. Las constantes de canje $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ se toman como $(0,1,0,1,0)$, $(0,1,0,1,0,1)$, $(0,1,0,1,0,05)$ y $(0,1,0,05,0,02)$ en los modelos XX, XXX, XXZ y XYZ, respectivamente.

termalización individual de cada uno de los espines. Es decir, que los más cercanos al extremo izquierdo termalicen más rápidamente que el resto. Sin embargo, como las colisiones con paquetes estrechos solo inducen transiciones entre autoestados puros de H_0 , las excitaciones de espín en realidad no están localizadas (excitaciones colectivas), dando como resultado un aumento uniforme del perfil de temperatura con cada colisión. En segundo lugar, nótese cómo el estado estacionario se alcanza con centenas de colisiones, suponiendo un proceso considerablemente más largo que en el caso de un único espín. De nuevo, esto depende, en su mayoría, de la longitud de la cadena y de la temperatura T_U del baño. Si $T_U > 10$,

las cadenas de 2 – 6 espines termalizan antes de las 300 colisiones.

Simular una cadena acoplada a dos termostatos es, en esencia, considerar una cadena en contacto con un solo termostato por un extremo y, tras una colisión, considerar que está acoplada solo al otro termostato por el otro extremo, y así sucesivamente. Ahora, tenemos dos posibles Hamiltonianos de interacción: $H_{US}^1 = j_x \sigma_x^{U_1} \otimes \sigma_x^S(1) + j_y \sigma_y^{U_1} \otimes \sigma_y^S(1)$ y $H_{US}^N = j_x \sigma_x^S(N) \otimes \sigma_x^{U_N} + j_y \sigma_y^S(N) \otimes \sigma_y^{U_N}$, de tal forma que las unidades incidentes sobre el espín en el extremo izquierdo (derecho) de la cadena siguen una distribución de efusión y tienen un estado interno correspondiente a una temperatura $T_{U_1} \equiv T_1$ ($T_{U_N} \equiv T_N$). Tomaremos $T_1 > T_N$, definiendo así el extremo caliente y frío, respectivamente.

A continuación, bombardeamos cadenas de 3 a 6 espines bajo diferentes modelos de canje con unidades calientes y frías y estudiamos sus perfiles de temperatura en el inset de la fig. 5a. A diferencia de los perfiles mostrados en las refs. [4–7], en los que, salvo bajo condiciones de transporte balístico (e.g. canje XX), se observa cómo gradualmente varía la temperatura en el interior de la cadena, nuestras simulaciones muestran perfiles planos. Esta peculiaridad es atribuible a las excitaciones colectivas de espín que inducen las colisiones. Así, la cadena alcanza una temperatura efectiva T_{eff} , tal que $T_N < T_{\text{eff}} < T_1$, aunque esta no coincide con la temperatura media $(T_1 + T_N)/2$ y parece tener una dependencia más complicada con el tamaño de la cadena [12]. En la fig. 5a se muestra como, en el estado estacionario, los flujos δQ_{in} y δQ_{out} , correspondientes a los cambios de energía inducidos por cada colisión caliente y fría, respectivamente, cumplen que $\delta Q_{\text{in}} \approx -\delta Q_{\text{out}}$, lo que nos permite definir el flujo estacionario δQ , igual al valor absoluto de estas cantidades.

Por último, revisamos si nuestro modelo reproduce la ley de Fourier (1), esto es, si $\delta Q \propto \Delta T/N$. En la fig. 5b se muestra la dependencia del flujo estacionario de cadenas de 3–6 espines en función de N para dos modelos de canje: XX y XYZ. Se han ajustado los resultados a curvas del tipo $\delta Q = cN^\alpha$, obteniendo un factor potencial $\alpha \approx -0,6$ en ambos casos, con un error de aproximadamente $\pm 0,1$ y $\pm 0,03$ para cada modelo, respectivamente. Así, ninguno de los escenarios parece corresponder al transporte difusivo característico de Fourier ($\alpha = -1$), sino más bien al régimen superdifusivo ($-1 < \alpha < 0$) en el que la conductividad térmica κ diverge como $\sim N^{\alpha+1}$. Por otro lado, la dependencia lineal con ΔT se mantiene, como muestra el inset de la misma figura.

IV. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha demostrado que los termostatos colisionales autónomos permiten una termalización efectiva incluso a bajas temperaturas, más allá del régimen de altas energías, de espines individuales y de cadenas. Se ha observado que las colisiones con paquetes de on-

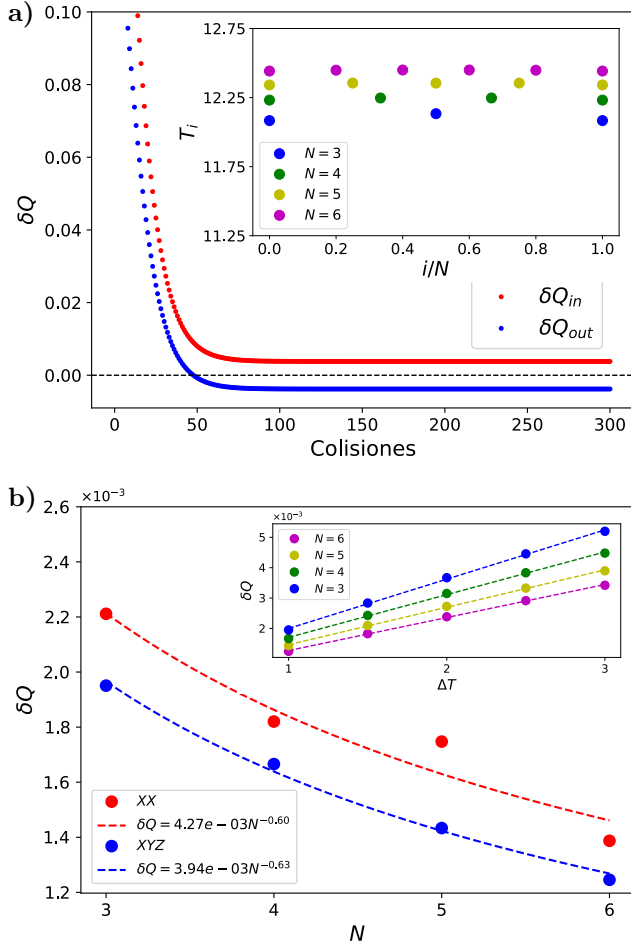


Figura 5. Cadenas acopladas a termostatos con distinta temperatura. (a) Flujos entrante δQ_{in} y saliente δQ_{out} en función del número de colisiones en una cadena XX de 6 qubits con $\Delta T = 3$ ($T_1 = 13$). El inset muestra los perfiles de temperatura de cadenas XYZ de 3 – 6 espines con $T_1 = 15$. (b) Flujo estacionario δQ de cadenas XX y XYZ con un gradiente térmico $\Delta T = 1$ ($T_1 = 11$) en función de N . Las líneas a trazos representan ajustes a potencias de N . El inset muestra la dependencia de δQ con ΔT para cadenas XYZ de 3, 4, 5 y 6 espines. En todos los casos se toma $j_x = 1, j_y = 0, \omega_S = \omega_U = 1, m = 0, 1$ y $L = 50$, se simulan 300 colisiones y el extremo frío se mantiene a $T_N = 10$. Las constantes de ajuste son aquellas descritas en la fig. 4.

da estrechos inducen excitaciones colectivas de espín, en contraste con la localidad artificial impuesta en modelos GKSL locales. Estas excitaciones colectivas explican la aparición de perfiles planos de temperatura incluso en cadenas acopladas a termostatos distintos en sus extremos.

Asimismo, el análisis del flujo térmico ha revelado un transporte superdifusivo, alejándose de lo descrito por la ecuación de Fourier. Estos resultados, sin embargo, no son extraños. Ha sido demostrado con anterioridad que el modelo de Heisenberg unidimensional presenta un

transporte de calor no difusivo debido a la conservación del operador de corriente de energía [3]. Sin embargo, y aunque en principio es deseable estudiar cadenas con un mayor número de espines, la variación de δQ con N en cadenas del tipo XX contrasta con estudios anteriores que muestran cómo estos sistemas transportan el calor de forma balística ($\alpha = 0$) cuando son acopladas a termostatos tipo GKSL locales [6]. Esto pone en directa evidencia la relevancia que tiene la forma de modelar los baños térmicos en estos estudios.

Sería interesante explorar colisiones que preserven parcialmente las coherencias, a diferencia del régimen de paquetes estrechos que las suprime, lo que podría permitir la localización espacial de las excitaciones de espín, aunque, posiblemente, comprometiendo la termalización del sistema.

-
- [1] R. Peierls, *Annalen der Physik* **395**, 1055 (1929).
 - [2] E. Fermi, P. Pasta, S. Ulam, and M. Tsingou, *Studies of nonlinear problems*, Tech. Rep. (Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, USA, 1955).
 - [3] X. Zotos, F. Naef, and P. Prelovsek, *Phys. Rev. B* **55**, 11029 (1997).
 - [4] K. Saito, *Europhysics Letters (EPL)* **61**, 34–40 (2003).
 - [5] T. Prosen and M. Žnidarič, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2009**, 02035 (2009).
 - [6] J. Wu and M. Berciu, *Phys. Rev. B* **83**, 214416 (2011).
 - [7] J. J. Mendoza-Arenas, S. Al-Assam, S. R. Clark, and D. Jaksch, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2013**, P07007 (2013).
 - [8] D. Manzano, M. Tiersch, A. Asadian, and H. J. Briegel, *Phys. Rev. E* **86**, 061118 (2012).
 - [9] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg, *Atom-Photon Interactions: Basic Processes and Applications* (Wiley, 1998).
 - [10] H. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, 2002).
 - [11] G. T. Landi, D. Poletti, and G. Schaller, *Rev. Mod. Phys.* **94**, 045006 (2022).
 - [12] F. Ciccarello, S. Lorenzo, V. Giovannetti, and G. M. Palma, *Physics Reports* **954**, 1–70 (2022).
 - [13] J. Ehrlich, M. Esposito, F. Barra, and J. M. Parrondo, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **552**, 122108 (2020).
 - [14] S. L. Jacob, M. Esposito, J. M. Parrondo, and F. Barra, *PRX Quantum* **2**, 020312 (2021).
 - [15] S. L. Jacob, M. Esposito, J. M. R. Parrondo, and F. Barra, *Quantum* **6**, 750 (2022).
 - [16] J. Tabanera, I. Luque, S. L. Jacob, M. Esposito, F. Barra, and J. M. R. Parrondo, *New Journal of Physics* **24**, 023018 (2022).
 - [17] B. Schumacher and M. Westmoreland, *Quantum Processes Systems, and Information* (Cambridge University Press, 2010).
 - [18] P. Markos and C. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials* (Princeton University Press, 2008).
 - [19] N. Lambert, *Qutip 5: The quantum toolbox in python* (2024), arXiv:2412.04705.
 - [20] N. Rivas, *Quantum collisional thermostats and heat transport* (2025), github.