ASYMMETRY INDUCED HEAT CURRENT RECTIFICATION AND MAGNIFICATION IN BOUNDARY DRIVEN SPIN AND FERMIONIC SYSTEMS

VIPUL UPADHYAY

DEPARTMENT OF PHYSICS

INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI

JUNE 2024

ASYMMETRY INDUCED HEAT CURRENT RECTIFICATION AND MAGNIFICATION IN BOUNDARY DRIVEN SPIN AND FERMIONIC SYSTEMS

VIPUL UPADHYAY

2018PHZ8435

Department of Physics

Submitted

in partial fulfillment of the requirements of the degree of Doctor of Philosophy

to the

INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI

JUNE 2024

Dedicated to my loving parents, Mr. Pradeep Kumar Upadhyay and Mrs. Damyanti Upadhyay

Certificate

This is to certify that the thesis entitled **"Asymmetry induced heat current rectification and magnification in boundary driven spin and fermionic systems"**, submitted by **Vipul Upadhyay** to the Department of Physics, Indian Institute of Technology Delhi, for the award of the degree of **Doctor of Philosophy** in Physics, is a record of the original, bona fide research work carried out by him under my supervision and guidance. The thesis has reached the standards fulfilling the requirements of the regulations related to the award of the degree.

The results contained in this thesis have not been submitted in part or in full to any other University or Institute for the award of any degree or diploma to the best of my knowledge.

28/06/2024

Prof. Rahul Marathe
Associate Professor
Department of Physics
Indian Institute of Technology Delhi
New Delhi - 110016, India

Acknowledgements

I would begin the acknowledgements by thanking my parents, Mr. Pradeep Kumar Upadhyay and Mrs. Damyanti Upadhyay, for all the love and support they have provided during my academic journey. They along with my two amazing sisters Vidhi and Jagrati, have always encouraged me to be an independent thinker and have constantly motivated me to pursue my academic interests. I owe most of my curiosities in science to the encouraging upbringing that they have provided.

I am highly indebted to my thesis supervisor, Prof. Rahul Marathe, for the wonderful experience I had during my time as a Ph.D. research scholar at IIT, Delhi. He has been an exemplary supervisor, excelling not only in academic supervision but also being a person whose individual qualities outside work are very inspiring and worth replicating. He has always amazed me with his penetrative thinking and his ability to ask the right questions. He granted me total academic freedom in the diverse research problems we explored, displaying unwavering patience when I encountered challenges. I owe most of the intuition that I developed in non-equilibrium dynamics to the years of collaboration with him.

I also want to thank my frequent collaborators cum teachers, Dr. Muhammad Tahir Naseem and Prof. Özgür Müstecaplıoğlu of Koç University, Istanbul, Türkiye. They have always been so kind and much of what I understand about Markovian Quantum Master Equations is due to the numerous conversations I had with them. A special thanks to Dr. Juzar Thingna at the American Physical Society for teaching me the significance of each approximation that goes inside deriving these equations microscopically.

I express my gratitude to my lab members and friends Rita, Mintu, Yatin sir, Yasir bhai, Vikky, Simmi, Roshan, Vikas, Monojit and Partho, for providing a familial environment inside the lab. It was a great pleasure to have such empathetic people around, always ready for providing help in professional as well as personal matters.

Lastly, I thank my friends. Getting a Ph.D. is a long journey, it would have been impossible to cover this entire journey without the love and support of each one of them. I can't imagine my Ph.D. life without Deepika, Ravindra, Vishal, Lalit, Sharad, Viresh, Arun bhai and many more who have made Delhi my primary home during this time. I will always cherish the many memories we made at the little den that we have in Jia Sarai.

Abstract

The broader aim of this thesis is to enhance our understanding of heat current transport in mesoscopic and nanoscopic quantum systems. To accomplish this, we investigate how structural asymmetry influences steady state thermal transport in such small scaled systems. We divide our studies into two sub-classes. One subclass deals with construction of thermal devices for better manipulation of heat currents and the other deals with the investigation of anomalous transport phenomenon due to asymmetry. We employ spin and fermionic lattice models for studying these sub-classes and the analysis is done using the quantum Markovian master equations.

Specifically, for the first subclass we study the construction of thermal diodes which are the most fundamental small scaled devices needed to manipulate heat currents. In the initial part of this subclass, we study the heat current rectification effects in a two qubit (spin-1/2 particle) setup. These two qubits interact with each other via the Dzyaloshinskii-Moriya (DM) interaction and are coupled to two separate heat baths. Off-resonant magnetic field is applied on these spins and it is observed that this inhomogeneous magnetic field serves as the asymmetry required for inducing the heat rectification. For the later segment of this subclass, we study the potential of a heat diode to distinguish different topological phases of the Su–Schrieffer–Heeger (SSH) model. This study explores in detail the role of heat transport as a potential indicator of topological phase transition in the SSH model, and demonstrates how the efficiency of the diode can be exploited as the quantity used to distinguish between the different topological phases.

In the second subclass, we study an interesting transport phenomena called Current Magnification (CM) or Current Circulation (CC). The investigation of this phenomenon requires placing a multi-branched system between the two heat baths. CM occurs when in one of the system branches, the local heat current is larger than the total heat current, and in the other branch, the heat current flows in opposite direction of the thermal gradient. This is necessary for conserving the total current at the junction. Similar to our treatment of heat rectification, we initiate this subclass by studying a small quantum spin setup. Here, we establish that the geometrical asymmetry of having unequal number of spins in different system branches is enough to generate CM. Analysing this system in more detail, we realise that CM usually occurs near the point of intersection of two otherwise non- degenerate energy levels. We call this point the Additional Energy Degeneracy Point

(AEDP). Next, we examine CM in a quadratic fermionic network and provide analytical proof of its possible presence near AEDP. Subsequently, we apply this idea to different fermionic models with quadratic Hamiltonians and verify the relationship between CM and AEDP.

In our efforts while examining both these subclasses, it becomes apparent that while asymmetry is a crucial condition for observing heat current rectification and magnification, it alone is insufficient for either of these phenomena, and other complementary properties like anharmonicity or AEDP in the system are required.

शोध सार

इस थीसिस का मुख्य उद्देश्य मेसोस्कोपिक और नैनोस्कोपिक क्वांटम तंत्रों में ऊष्मा धारा परिवहन की हमारी समझ का विस्तार करना है। इस लक्ष्य को प्राप्त करने के लिए, हम इन लघु-स्तरीय तन्त्रों में स्थिर-अवस्था ऊष्मा परिवहन पर संरचनात्मक असममिति के प्रभाव की जांच करते हैं। हम अपने अध्ययन को दो भागों में विभाजित करते हैं। एक भाग ऊष्मा धाराओं को बेहतर तरीके से नियंत्रित करने के लिए ऊष्मा उपकरणों के निर्माण पर केंद्रित है, और दूसरा असममिति के परिणामस्वरूप होने वाली असामान्य ऊष्मा परिवहन घटनाओं का अन्वेषण करता है। हम इन भागों का अध्ययन करने के लिए स्पिन और फर्मियोनिक लैटिस मॉडल का उपयोग करते हैं, एवं विश्लेषण के लिए क्वांटम मार्कोवियन मास्टर समीकरण का प्रयोग करते हैं।

विशेष रूप से पहले भाग के लिए हम ऊष्मा डायोड के निर्माण का अध्ययन करते हैं। यह ऊष्मा धाराओं को प्रबंधित करने के लिए सबसे मौलिक छोटे पैमाने के उपकरण हैं। इस उप-वर्ग के प्रारंभिक भाग में, हम एक दो क्यूबिट (स्पिन-1/2) तंत्र में ऊष्मा धाराओं के प्रवाह का अध्ययन करते हैं। ये दो क्यूबिट अलग-अलग तापमान के ऊष्मा स्नानों से जुड़े हैं, एवं एक दूसरे पर इ्ज़्यालोशिन्स्की-मोरिया (डी. एम.) प्रभाव के द्वारा असर डालते हैं। इन दो स्पिन पर अलग अलग चुंबकीय क्षेत्र डाला जाता है जिस कारण ऊष्मा धारा के प्रवाह में असममिति आती है, जिसके परिणामस्वरूप ऊष्मा डायोड का निर्माण किया जाता है। इस वर्ग के आगे के हिस्से में, हम एक ऐसे ऊष्मा डायोड की संभावना का अध्ययन करते हैं जो सु-श्रीफर-हीगर (एस. एस. एच.) मॉडल के विभिन्न टॉपोलॉजिकल चरणों को अलग करने के लिए उपयुक्त है। यह अध्ययन एस. एस. एच. मॉडल में ऊष्मा परिवहन की भूमिका को विस्तार से जांचता है, और सिद्ध करता है कि ऊष्मा परिवहन से भिन्न टॉपोलॉजिकल चरणों को चिन्हित किया जा सकता है।

दूसरे भाग में, हम एक रोचक परिवहन प्रक्रिया का अध्ययन करते हैं, जिसे 'करंट मैग्निफिकेशन' (सी. एम.) या 'करंट सर्कुलेशन' (सी.सी.) कहा जाता है। इस अन्वेषण के लिए, हमें दो ऊष्मा स्नानों के बीच एक बहु शाखायुक्त तन्त्र रखना होता है। सी.एम. तब होता है जब एक शाखा में स्थानीय ऊष्मा धारा का परिमाण कुल ऊष्मा धारा के परिमाण से अधिक हो जाता है। परिणामस्वरूप दूसरी शाखा में, ऊष्मा धारा का प्रवाह तापमान पक्ष की विपरीत दिशा में होता है। यह कुल धारा को संगम पर संरक्षित रखने के लिए आवश्यक होता है।

हम पिछले भाग की तरह ही, इस खंड की शुरुआत एक छोटे क्वांटम स्पिन तंत्र का अध्ययन करके करते हैं। यहाँ, हम सिद्ध करते हैं कि शाखाओं में असमान संख्या के स्पिनों की ज्यामितिक असममिति सी. एम. उत्पन्न करने के लिए पर्याप्त है। इस प्रणाली को अधिक विस्तृत रूप से विश्लेषित करते हुए, हम पातें हैं कि सी.एम. आमतौर पर दो गैर-समान ऊर्जा स्तरों के संपर्क के बिंदु के पास होता है। हम इस बिंदु को अतिरिक्त ऊर्जा समानता बिंदु (ए.इ.डी.पी.) कहते हैं। इस

अवलोकन को ध्यान में रखते हुए, आगे हम एक क्वाड्रटिक फर्मियोनिक संजाल में सी.एम. का अध्ययन करते हैं। यहाँ हम सी.एम. और ए.इ.डी.पी. के बीच के संबंध की विश्लेषणात्मक पुष्टि करते हैं, एवं इस प्रकल्पना की अलग-अलग क्वांटम तंत्रो में जांच करते हैं।

अंततः हमारे प्रयासों के दौरान यह स्पष्ट होता है कि असममिता ऊष्मा डायोड के निर्माण एवं सी.एम. के अवलोकन के लिए एक महत्वपूर्ण शर्त है। लेकिन केवल यह अपने आप में पर्याप्त नहीं है, और अन्य सहायक गुणात्मक गुणों जैसे कि अन्हारमोनिसिटी या ए.इ.डी.पी. की भी आवश्यकता होती है।

Contents

List of Figures

Abbreviations

DM	**D**zyaloshinskii-**M**oriya
SSH	**S**u–**S**chrieffer–**H**eeger
CM	**C**urrent **M**agnification
CC	**C**urrent **C**irculation
AEDP	**A**dditional **E**nergy **D**egeneracy **P**oint
R.B.T.	**R**ight **B**ath **T**erms
H.C.	**H**ermitian–**C**onjugate

Symbols

k_B	Boltzmann Constant
$\hbar$	Reduced Planck's constant
$\hat{H}_T$	Total System Hamiltonian
$\hat{H}_S$	Hamiltonian of the system of interest
$\hat{H}_B$	Bath Hamiltonian
$\hat{\rho}$, $\hat{\rho}_S$	Density matrix of the system of interest
$\hat{\rho}_B$	Density matrix of the Bath
$\hat{\rho}_T$	Density matrix of the total system (System + Bath)
$\mathcal{D}_i[\hat{\rho}]$	i-th Dissipator
$\mathcal{D}_i(\hat{A})[\hat{\rho}]$	Lindblad Dissipator with operator $\hat{A}$
$\mathcal{L}_L[\hat{\rho}]$	Left Liouville Superoperator
$\mathcal{L}_R[\hat{\rho}]$	Right Liouville Superoperator
$I_{L(R)}$	Heat current flowing out of left (right) bath
$\mathcal{R}$	Heat Rectification
$\hat{\sigma}_j^i$	i-th Pauli matrix corresponding to j-th spin
$C(\rho_{i,j})$	Concurrence between spins i and j