Termodinámica Avanzada

Guía 7: Ciclo de Otto cuántico

Deconstruyendo la guía

Guía 7 - Ejercicio 1

Partimos de un Hamiltoniano

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2(t) x^2$$

donde $\omega(0) = \omega_1$ y $\omega(\tau) = \omega_2$.

Guía 7 - Ejercicio 1

Partimos de un Hamiltoniano

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2(t) x^2$$

donde $\omega(0) = \omega_1$ y $\omega(\tau) = \omega_2$.

En general, los autoestados $|n, 0\rangle$ de $H(t)$ **no** son solución de la ec. de Schrödinger $\Longrightarrow$ si arrancamos en $|n, 0\rangle$ $\exists$ una prob. no nula $p_{mn}(\tau)$ de ser observado en $|m, \tau\rangle$.

Guía 7 - Ejercicio 1

Partimos de un Hamiltoniano

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2(t) x^2$$

donde $\omega(0) = \omega_1$ y $\omega(\tau) = \omega_2$.

En general, los autoestados $|n, 0\rangle$ de $H(t)$ **no** son solución de la ec. de Schrödinger $\Longrightarrow$ si arrancamos en $|n, 0\rangle$ $\exists$ una prob. no nula $p_{mn}(\tau)$ de ser observado en $|m, \tau\rangle$.

Nos será de conveniencia introducir la fc. generatriz de estas probabilidades

$$P(u, v) \equiv \sum_{m,n} u^m v^n p_{mn}(\tau)$$

con $u, v \in [-1, 1]$.

Guía 7 - Ejercicio 1

Resolviendo la ec. de Schrödinger se puede probar que la función generatriz está dada por

$$P(u,v) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{Q(1-u^2)(1-v^2)+(1+u^2)(1+v^2)-4uv}}$$

con

$$Q = \frac{1}{2\omega_1\omega_2}\left\{\omega_1^2\left[\omega_2^2X^2(\tau)+\dot{X}^2(\tau)\right]+\left[\omega_2^2Y^2(\tau)+\dot{Y}^2(\tau)\right]\right\}$$

donde $X(t)$ e $Y(t)$ son soluciones de la ec. de movimiento clásica $\ddot{x}+\omega^2(t)x=0$, con C.I. $X(0)=0\,,\dot{X}(0)=1\,,Y(0)=1\,,\dot{Y}(0)=0$.

Guía 7 - Ejercicio 1

Resolviendo la ec. de Schrödinger se puede probar que la función generatriz está dada por

$$P(u,v) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{Q(1-u^2)(1-v^2) + (1+u^2)(1+v^2) - 4uv}}$$

con

$$Q = \frac{1}{2\omega_1\omega_2}\left\{\omega_1^2\left[\omega_2^2 X^2(\tau) + \dot{X}^2(\tau)\right] + \left[\omega_2^2 Y^2(\tau) + \dot{Y}^2(\tau)\right]\right\}$$

donde $X(t)$ e $Y(t)$ son soluciones de la ec. de movimiento clásica $\ddot{x} + \omega^2(t)x = 0$, con C.I. $X(0) = 0\,, \dot{X}(0) = 1\,, Y(0) = 1\,, \dot{Y}(0) = 0$.

¿Pero de dónde sale todo esto?

Progress of Theoretical Physics, Vol. 9, No. 4, April 1953

Miscellanea in Elementary Quantum Mechanics, II

Kôdi HUSIMI

Department of Physics, Osaka University

(Received March 22, 1953)

It is a rather curious fact that the exact quantal treatment of forced oscillation has only recently been discovered to be feasible. There may be a lot of general arguments[1] which make the possiblity of such a treatment very convincing, but I myself find the ground for it in an elementary observation that the wave equation of forced harmonic oscillation, including the case of subharmonic resonance, admits a solution of Gaussian type, *i. e.* of the form: an exponential of a quadratic. On this basis the complete solution and the related problems are analyzed here.

* Husimi, Kôdi. *Miscellanea in elementary quantum mechanics, II.* Progress of Theoretical Physics 9.4 (1953): 381-402. (https://academic.oup.com/ptp/article/9/4/381/1849279).

Soluciones a Schrödinger

Queremos resolver

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

Soluciones a Schrödinger

Queremos resolver

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= H\psi \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{m}{2}\omega^2(t)x^2\psi
\end{aligned}
$$

Soluciones a Schrödinger

Queremos resolver

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= H\psi \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{m}{2}\omega^2(t)x^2\psi
\end{aligned}
$$

Proponemos como solución una función de onda del tipo Gaussiana

$$\psi = e^{\frac{i}{2\hbar}[a(t)x^2+2b(t)x+c(t)]}$$

Soluciones a Schrödinger

Queremos resolver

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= H\psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{m}{2}\omega^2(t)x^2\psi \end{aligned}$$

Proponemos como solución una función de onda del tipo Gaussiana

$$\psi = e^{\frac{i}{2\hbar}[a(t)x^2+2b(t)x+c(t)]}$$

Derivando y reemplazando

$$-\frac{1}{2}[\dot{a}x^2 + 2\dot{b}x + \dot{c}] = \frac{1}{8m}(4a^2x^2 + 4b^2 + 8abx) - \frac{\hbar}{2m}ia + \frac{m}{2}\omega^2x^2$$

que debe ser solución para todo x.

Soluciones a Schrödinger

Queremos resolver

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= H\psi \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{m}{2}\omega^2(t)x^2\psi
\end{aligned}
$$

Proponemos como solución una función de onda del tipo Gaussiana

$$\psi = e^{\frac{i}{2\hbar}[a(t)x^2+2b(t)x+c(t)]}$$

Derivando y reemplazando

$$-\frac{1}{2}[\dot{a}x^2 + 2\dot{b}x + \dot{c}] = \frac{1}{8m}(4a^2x^2 + 4b^2 + 8abx) - \frac{i\hbar}{2m}a + \frac{m}{2}\omega^2x^2$$

que debe ser solución para todo x.

$\longrightarrow$ resolvemos ecuaciones para $\{x^2, x, 1\}$.

Soluciones a Schrödinger

$$-[\dot{a}x^2 + 2\dot{b}x + \dot{c}] = \frac{1}{4m}(4a^2x^2 + 4b^2 + 8abx) - \frac{i\hbar}{m}a + m\omega^2x^2$$

$$\begin{cases} \dot{a} & = -\frac{a^2}{m} - m\omega^2 \\ \dot{b} & = -\frac{ab}{m} \\ \dot{c} & = \frac{i\hbar}{m}a - \frac{b^2}{m} \end{cases}$$

Soluciones a Schrödinger

$$-[\dot{a}x^2 + 2\dot{b}x + \dot{c}] = \frac{1}{4m}(4a^2x^2 + 4b^2 + 8abx) - \frac{i\hbar}{m}a + m\omega^2x^2$$

$$\begin{cases} \dot{a} & = -\frac{a^2}{m} - m\omega^2 \\ \dot{b} & = -\frac{ab}{m} \\ \dot{c} & = \frac{i\hbar}{m}a - \frac{b^2}{m} \end{cases}$$

Proponemos como solución (ec. Riccati)

$$a(t) = \frac{m\dot{X}(t)}{X(t)}$$

y por ende

$$\ddot{X}(t) + \omega^2(t)X(t) = 0$$

¿Y la función generatriz?

Propagador

- La solución ψ propuesta es una de las tantas posibles, no es la más general.

Propagador

- La solución ψ propuesta es una de las tantas posibles, no es la más general.
- Sin embargo, como la dinámica del oscilador es Gaussiana, podemos obtener las soluciones a partir de la **función de onda inicial** $\psi(x_0, t_0)$ y del **propagador** $U(x, t|x_0, t_0)$ según

$$\psi(x, t) = \int dx_0 \, U(x, t|x_0, t_0)\psi(x_0, t_0)$$

donde

$$U(x, t|x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t_0)}} e^{-\frac{m(x-x_0)^2}{2i\hbar(t-t_0)}}$$

Propagador

$$U(x, t|x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t_0)}}e^{-\frac{m(x-x_0)^2}{2i\hbar(t-t_0)}}$$

Si llamamos $\sigma^2 = \frac{i\hbar(t-t_0)}{m}$

$$U(x, t|x_0, t_0) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

Propagador

$$U(x, t|x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t_0)}} e^{-\frac{m(x-x_0)^2}{2i\hbar(t-t_0)}}$$

Si llamamos $\sigma^2 = \frac{i\hbar(t-t_0)}{m}$

$$U(x, t|x_0, t_0) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

¿Y de dónde surge esto?

Propagador

Dadas dos densidades de probabilidad del tipo Gaussiana $p(x,t), p(x_0,t_0)$ se puede demostrar que satisfacen la condicional

$$p(x,t|x_0,t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

Propagador

Dadas dos densidades de probabilidad del tipo Gaussiana $p(x, t), p(x_0, t_0)$ se puede demostrar que satisfacen la condicional

$$p(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t - t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

Más aún, dichas densidades satisfacen

$$p(x, t|x_0, t_0) = \int dx' \, p(x, t|x', t') p(x', t'|x_0, t_0) \, , \qquad t_0 < t' < t$$

Propagador

Dadas dos densidades de probabilidad del tipo Gaussiana $p(x,t), p(x_0,t_0)$ se puede demostrar que satisfacen la condicional

$$p(x,t|x_0,t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

Más aún, dichas densidades satisfacen

$$\begin{aligned} p(x,t|x_0,t_0) &= \int dx'\, p(x,t|x',t')p(x',t'|x_0,t_0) \\ &= \frac{1}{2\pi}\int dx'\, \frac{1}{\sqrt{(t-t')(t'-t_0)}} e^{-\frac{(x-x')^2}{2(t-t')}-\frac{(x'-x_0)^2}{2(t'-t_0)}} \end{aligned}$$

Propagador

Dadas dos densidades de probabilidad del tipo Gaussiana $p(x,t), p(x_0,t_0)$ se puede demostrar que satisfacen la condicional

$$p(x,t|x_0,t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

Más aún, dichas densidades satisfacen

$$\begin{aligned}
p(x,t|x_0,t_0) &= \int dx'\, p(x,t|x',t')p(x',t'|x_0,t_0) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int dx'\, \frac{1}{\sqrt{(t-t')(t'-t_0)}} e^{-\frac{(x-x')^2}{2(t-t')}-\frac{(x'-x_0)^2}{2(t'-t_0)}} \\
&= \ldots \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}
\end{aligned}$$

Propagador

- $$p(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t - t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

Propagador

- $$p(x,t|x_0,t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

- $$p(x,t|x_0,t_0) \rightarrow \delta(x-x_0)\,, \qquad t \rightarrow t_0$$

Propagador

- $$p(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$
- $$p(x, t|x_0, t_0) \to \delta(x - x_0)\,, \qquad t \to t_0$$

$\longrightarrow$ en este sentido decimos que es el **propagador** ($\sim$ op. de ev. temporal)

Recapitulando

Tenemos

$$U(x, t|x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t_0)}} e^{-\frac{m(x-x_0)^2}{2i\hbar(t-t_0)}}$$

y queremos que cuando $t \to t_0$ se comporte como $\delta(x - x_0)$

Recapitulando

Tenemos

$$U(x,t|x_0,t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\, e^{-\frac{m(x-x_0)^2}{2i\hbar(t-t_0)}}$$

y queremos que cuando $t \to t_0$ se comporte como $\delta(x-x_0) \Longrightarrow$ es equivalente a pedir las condiciones iniciales $X(0)=0, \dot{X}(0)=1$, $Y(0)=1$, $\dot{Y}(0)=0$ tales que

$$U(x,t|x_0,t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar X(t)}}\, e^{-\frac{m}{2i\hbar X(t)}[\dot{X}(t)x^2 - 2xx_0 + Y(t)x_0^2]}$$

Función generatriz (finalmente)

Sabiendo que U es el propagador, podemos escribir la probabilidad de transición, $p_{nm}(\tau)$, de terminar en un estado final $|m,\tau\rangle$ dado que empezamos en el estado inicial $|n,0\rangle$ según

$$p_{mn}(\tau) = \left| \int dx_0 \int dx\, \phi_m^*(x,\tau) U(x,\tau|x_0,0) \phi_n(x_0,0) \right|^2$$

con $\phi_n(x,t)$: autoestado de $H(t)$.

Función generatriz

Sabiendo que U es el propagador, podemos escribir la probabilidad de transición, $p_{nm}(\tau)$, de terminar en un estado final $|m, \tau\rangle$ dado que empezamos en el estado inicial $|n, 0\rangle$ según

$$p_{mn}(\tau) = \left| \int dx_0 \int dx \, \phi_m^*(x, \tau) U(x, \tau | x_0, 0) \phi_n(x_0, 0) \right|^2$$

con $\phi_n(x, t)$: autoestado de $H(t)$.

Sin embargo, calcular $p_{mn}(\tau)$ a partir de acá puede/suele ser muy complicado. Además, desconocemos quiénes son $\phi_n(x, t)$

Función generatriz

Sabiendo que U es el propagador, podemos escribir la probabilidad de transición, $p_{nm}(\tau)$, de terminar en un estado final $|m, \tau\rangle$ dado que empezamos en el estado inicial $|n, 0\rangle$ según

$$p_{mn}(\tau) = \left| \int dx_0 \int dx \, \phi_m^*(x, \tau) U(x, \tau | x_0, 0) \phi_n(x_0, 0) \right|^2$$

con $\phi_n(x, t)$: autoestado de $H(t)$.

Sin embargo, calcular $p_{mn}(\tau)$ a partir de acá puede/suele ser muy complicado. Además, desconocemos quiénes son $\phi_n(x, t) \Longrightarrow$ conviene introducir algún método o forma alternativa de calcular dicha probabilidad

Función generatriz ☺

Función generatriz

Definimos la función generatriz según

$$P(u,v) = \sum_{n,m} u^m v^n p_{nm}(\tau)$$

Función generatriz

Definimos la función generatriz según

$$P(u,v) = \sum_{n,m} u^m v^n p_{nm}(\tau)$$

Más explícitamente

$$P(u,v) = \sum_{n,m} u^m v^n \int dx dx' dx_0 dx_0' \, \phi_m^*(x,\tau) U(x,\tau|x_0,0) \phi_n(x_0,0) \times$$
$$\times \; \phi_m(x',\tau) U^*(x',\tau|x_0',0) \phi_n^*(x_0',0)$$

Función generatriz

Definimos la función generatriz según

$$P(u,v)=\sum_{n,m}u^m v^n p_{nm}(\tau)$$

Más explícitamente

$$P(u,v)=\sum_{n,m}u^m v^n\int dxdx'dx_0dx_0'\,\phi_m^*(x,\tau)U(x,\tau|x_0,0)\phi_n(x_0,0)\times$$
$$\times\ \phi_m(x',\tau)U^*(x',\tau|x_0',0)\phi_n^*(x_0',0)$$

Utilizando explícitamente la forma de las funciones de onda $\phi_k(x,t)\sim e^{-x^2}e^{-iE_kt}$ y del propagador, podemos integrar la ec. y llegamos a que

$$P(u,v)=\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{Q(1-u^2)(1-v^2)+(1+u^2)(1+v^2)-4uv}}$$

con $Q=\frac{1}{2\omega_1\omega_2}\left\{\omega_1^2\left[\omega_2^2X^2(\tau)+\dot{X}^2(\tau)\right]+\left[\omega_2^2Y^2(\tau)+\dot{Y}^2(\tau)\right]\right\}$