Teoría Avanzada de la Termodinámica – 2do cuatrimestre de 2023

Guía 7: *Ciclo de Otto cuántico*

Considere un motor cuya sustancia de trabajo es un oscilador armónico cuántico con frecuencia $\omega(t)$ variable. La frecuencia cambia entre ω_1 y ω_2, con $\omega_2 > \omega_1$, y el oscilador está alternativamente en contacto con dos reservorios térmicos a temperaturas T_1 y T_2, con $T_2 > T_1$. Con este sistema puede establecerse una análogo cuántico al ciclo de Otto, consistente de cuatro tramos:

- **Compresión adiabática**. El sistema parte del equilibrio con el reservorio a temperatura T_1 con frecuencia ω_1 (estado A); se lo aísla del reservorio y se le aplica un protocolo por el que la frecuencia varía con el tiempo, hasta alcanzar el valor final ω_2. Al estado final de este tramo lo llamamos el estado B.

- **Calentamiento isocórico**. Se pone al sistema en contacto con el reservorio a temperatura T_2, y se deja que equilibre manteniendo la frecuencia constante, llegando al estado C.

- **Expansión adiabática**. Se aísla al sistema del reservorio y se hace disminuir su frecuencia hasta alcanzar de nuevo el valor ω_1. Al estado final de este tramo lo llamamos el estado D.

- **Enfriamiento isocórico**. Se pone al sistema en contacto con el reservorio a temperatura T_1, y se deja que equilibre manteniendo la frecuencia constante, volviendo al estado A.

1. Consideremos primero qué ocurre durante los tramos adiabáticos, en los cuales la evolución unitaria del sistema está determinada por el hamiltoniano dependiente del tiempo

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

donde la frecuencia $\omega(t)$ es variada externamente desde un valor ω_1 a $t = 0$ hasta un valor ω_2 a $t = \tau$. En general, los autoestados $|n, t\rangle$ de $H(t)$ no son solución de la ecuación de Schrödinger, y por lo tanto, si el sistema arranca en el estado $|n, 0\rangle$, tiene una probabilidad no nula $p_{mn}(\tau)$ de ser observado en el estado $|m, \tau\rangle$ al final de la evolución. Es conveniente introducir la función generatriz de estas probabilidades,

$$P(u, v) \equiv \sum_{m,n} u^m v^n p_{mn}(\tau), \tag{2}$$

donde $u, v \in [-1, 1]$. Resolviendo explícitamente la ecuación de Schrödinger, es posible probar [1] que esta función generatriz está dada por

$$P(u, v) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{Q^*(1 - u^2)(1 - v^2) + (1 + u^2)(1 + v^2) - 4uv}}, \tag{3}$$

donde

$$Q^* = \frac{1}{2\omega_1\omega_2} \left\{ \omega_1^2 \left[\omega_2^2 X^2(\tau) + \dot{X}^2(\tau) \right] + \left[\omega_2^2 Y^2(\tau) + \dot{Y}^2(\tau) \right] \right\} \tag{4}$$

y las funciones $X(t)$ e $Y(t)$ son las soluciones de la ecuación del movimiento clásica, $\ddot{x}+\omega^2(t)x = 0$, con condiciones iniciales $X(0) = 0$, $\dot{X}(0) = 1$, $Y(0) = 1$, $\dot{Y}(0) = 0$.

a) Muestre que la normalización de las probabilidades, $\sum_m p_{mn}(\tau) = 1$, equivale a $P(1, v) = 1/(1 - v)$. Muestre que la función generatriz (3) satisface esta condición.

b) Muestre que $Q^* \geq 1$. Para ver esto, muestre primero que el wronskiano $W(x, y) = \dot{x}y - x\dot{y}$ de dos soluciones cualesquiera x e y de la ecuación del movimiento clásica es una constante, y después use que

$$(\omega_1\omega_2 X + \dot{Y})^2 + (\omega_1\dot{X} - \omega_2 Y)^2 \geq 0. \tag{5}$$

c) Encuentre Q^*, y de ahí $P(u, v)$, para el caso en el que la frecuencia del oscilador es mantenida constante ($\omega(t) = \omega_1$), y muestre que en este caso, como era de esperarse, no hay transiciones (es decir, $p_{mn}(\tau) = \delta_{mn}$).

d) Si la frecuencia no es constante pero su variación es infinitamente lenta, la teoría de invariantes adiabáticos muestra que cualquier solución $x(t)$ de la ecuación del movimiento clásica cumple

$$\frac{\dot{x}^2 + \omega^2(t)x^2}{\omega(t)} = \text{constante}. \tag{6}$$

A partir de este resultado, muestre que en este caso Q^* toma el mismo valor que en el caso de frecuencia constante. En consecuencia, se sigue cumpliendo la regla de selección $p_{mn}(\tau) = \delta_{mn}$, lo cual es una forma de expresar el teorema adiabático cuántico.

e) Volvamos al caso general. Si el sistema arranca en el estado $|n, 0\rangle$, el valor de expectación $\langle m \rangle_n$ del número de ocupación en el estado final puede calcularse a partir de la derivada $(\partial P/\partial u)(1, v)$. Calcule $\langle m \rangle_n$ en función de Q^*. Muestre que $\langle m \rangle_n - n$ es una función creciente de Q^*, así que este parámetro mide cuánto se aleja la evolución del régimen dictado por el teorema adiabático. Por esta razón, a Q^* se lo llama **parámetro de adiabaticidad**.

f) Con el resultado anterior, muestre que el valor medio de la energía del sistema a tiempo τ, si el estado inicial es un estado térmico a temperatura T, es

$$\langle H(\tau) \rangle = \frac{\hbar\omega_2}{2}\, Q^* \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega_1}{2}\right). \tag{7}$$

2. Utilizando los resultados del problema anterior, y volviendo al ciclo de Otto cuántico descripto al principio de la guía:

a) Escriba el valor medio de la energía en los puntos A, B, C y D, considerando que las transformaciones en los tramos AB y CD están caracterizadas por parámetros de adiabaticidad Q_1^* y Q_2^* respectivamente.

b) Obtenga el trabajo entregado por el motor (disminución de energía media) en los tramos adiabáticos y el calor absorbido (incremento de energía media) en los tramos isocóricos.

c) Muestre que, para que el trabajo total $W = W_{AB} + W_{CD}$ sea no negativo, es decir, para que la máquina opere realmente como un motor, una condición necesaria es $\omega_1/\omega_2 \geq T_1/T_2$.

d) Calcule la eficiencia $\eta = W/Q_{BC}$ del motor, y muestre que cumple $\eta \leq 1 - \omega_1/\omega_2$.

e) Encuentre la combinación de los parámetros del problema que permite alcanzar la eficiencia de Carnot. ¿Cuánto es el trabajo total en este caso?

3. Dos características esenciales de un motor térmico son su potencia de salida,

$$P = \frac{W}{\tau},$$

donde τ es la duración total del ciclo, y su eficiencia a máxima potencia. Considere primero el caso en el que la modulación entre frecuencias es cuasiestacionaria. Utilizando los resultados del problema anterior:

a) Calcule la relación entre frecuencias y temperaturas que determina la potencia máxima de salida, en el límite de altas temperaturas ($\beta_i \hbar \omega_j \ll 1$, para $i, j = 1, 2$). Asuma que la duración total del ciclo y la frecuencia inicial están fijas, y optimice con respecto a la frecuencia final. Con el resultado obtenido, determine la eficiencia a máxima potencia.

b) Repita el ítem anterior en el límite "cuántico" en que la temperatura del reservorio frío es muy baja, mientras que el reservorio caliente se mantiene a temperatura muy alta.

c) Otro caso de interés es aquel en el que se produce un cambio repentino en las frecuencias (frecuentemente llamado *quench*). En este caso, el resultado para los parámetros de adiabaticidad es [3]:

$$Q_{1,2}^* = \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2\omega_1\omega_2}. \tag{8}$$

Repita los cálculos de los dos items anteriores para este caso.

Referencias

[1] Husimi, Kôdi. *Miscellanea in elementary quantum mechanics, II.* Progress of Theoretical Physics 9.4 (1953): 381-402.

[2] Deffner, Sebastian, Obinna Abah, and Eric Lutz. *Quantum work statistics of linear and nonlinear parametric oscillators.* Chemical Physics 375.2-3 (2010): 200-208.

[3] Deffner, Sebastian, and Eric Lutz. *Nonequilibrium work distribution of a quantum harmonic oscillator.* Physical Review E 77.2 (2008): 021128.