Teoría Avanzada de la Termodinámica – 1er. cuatrimestre de 2018

Guía 8: *Ciclo de Otto cuántico*

Considere un motor cuántico cuyo sistema 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 baños térmicos a temperaturas inversas $\beta_i = 1/k_B T_i$, con $i = 1, 2$, $T_2 > T_1$, y k_B la constante de Boltzmann. Con este sistema puede establecerse una análogo cuántico al ciclo de Otto, consistente de cuatro tramos bien definidos:

- $A(\omega_1, \beta_1) \to B(\omega_2, \beta_1)$: **compresión adiabática** (también llamada compresión isoentrópica), en la que la frecuencia varía durante un tiempo τ_1 mientras el sistema está aislado de ambos baños térmicos. Durante este tramo el sistema incrementa su escala de energía.

- $B(\omega_2, \beta_1) \to C(\omega_2, \beta_2)$: **calentamiento isocórico**. En este tramo el oscilador está acoplado débilmente al baño caliente de temperatura β_2 durante un tiempo τ_2. La frecuencia del oscilador es mantenida constante durante este tramo, y se le permite relajarse hasta alcanzar el estado térmico C.

- $C(\omega_2, \beta_2) \to D(\omega_1, \beta_2)$: **expansión adiabática**. Durante este tramo la frecuencia del oscilador es variada nuevamente hasta alcanzar su valor inicial, manteniéndose aislado de ambos entornos durante un tiempo τ_3. El sistema de trabajo reduce su escala de energía.

- $D(\omega_1, \beta_2) \to A(\omega_1, \beta_1)$: **enfriamiento isocórico**. Durante este tramo el sistema está débilmente acoplado al baño frío cuya temperatura inversa es $\beta_1 > \beta_2$, durante un tiempo τ_4. El oscilador se relaja hasta su estado térmico inicial A, mientras la temperatura se mantiene constante.

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

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

donde la frecuencia $\omega(t)$ es variada externamente desde un valor ω_1 a $t = 0$ hasta un valor ω_2 a $t = \tau$.

a) Proponga una solución tipo Gaussiana para la ecuación de Schrödinger del sistema, es decir, una función de onda de la forma

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

y muestre que resolver la ecuación de Schrödinger se reduce a resolver tres ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas.

b) Haciendo el cambio de variables $a(t) = m\dot{X}(t)/X(t)$, muestre que todo el problema se puede reducir a resolver un oscilador armónico clásico con frecuencia variable $\omega(t)$,

$$\ddot{X}(t) + \omega^2(t)X(t) = 0 \tag{3}$$

Es decir que la solución al problema cuántico va a quedar completamente determinada por las soluciones clásicas $X(t)$. Obviamente, las soluciones del tipo (2) no son las más generales que es posible obtener. Sin embargo, como la dinámica del oscilador armónico es Gaussiana para cualquier $\omega(t)$, es posible obtener, conociendo de las soluciones clásicas $X(t)$, cualquier solución al problema a partir de su **propagador** $U(x, t|x_0, t_0)$ y de la función de onda inicial $\psi(x, t_0)$ de la siguiente manera:

$$\psi(x,t) = \int dx_0 U(x,t|x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)\,, \tag{4}$$

donde el propagador para este problema está dado por [1]

$$U(x,t|x_0,t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar X(t)}}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar X(t)}\left[\dot{X}(t)x^2 - 2xx_0 + Y(t)x_0^2\right]\right\}\,, \tag{5}$$

donde $X(t)$ e $Y(t)$ son soluciones de la ecuación (3) que satisfagan las condiciones iniciales $X(0) = 0$, $\dot{X}(0) = 1$, $Y(0) = 1$. $\dot{Y}(0) = 0$.

c) El hecho de que la frecuencia varíe va a inducir transiciones entre los diferentes autoestados de energía del oscilador armónico. Nos interesa calcular las probabilidades de transición $p_{m,n}(\tau)$ de terminar en un estado final $|m\rangle$ a $t = \tau$ si comenzamos en un estado inicial $|n\rangle$ a $t = 0$. Estos autoestados están referidos a la base instantánea que diagonaliza el Hamiltoniano con frecuencia $\omega(t)$ en el instante t, cuyas autofunciones instantáneas serán $\phi_n(x, t)$, asociadas a las energías $E_n(t) = \hbar\omega(t)(n + 1/2)$. Muestre que $p_{m,n}(\tau)$ puede escribirse como

$$p_{m,n}(\tau) = \left|\int dx_0 \int dx \phi_m^*(x,\tau)U(x,\tau|x_0,0)\phi_n(x_0,0)\right|^2 . \tag{6}$$

Es posible definir la *función generadora* de $p_{m,n}(\tau)$, que resulta útil a la hora de realizar ciertos cálculos, como

$$P(u,v) = \sum_{m,n} u^m v^n p_{m,n}(\tau)\,. \tag{7}$$

Utilizando explícitamente la forma de las funciones de onda $\phi_n(x, t)$ y del propagador, es posible llegar a la siguiente expresión para $P(u, v)$:

$$P(u,v) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{Q^*(1-u^2)(1-v^2) + (1+u^2)(1+v^2) - 4uv}}\,. \tag{8}$$

De la expresión anterior, es claro que la dependencia de la función generadora de las probabilidades de transición en sus variables es exactamente la misma para toda posible transformación de la frecuencia $\omega(t)$. Los detalles de la parametrización específica aparecen, a través de las soluciones de la ecuación clásica (3), en el valor del parámetro Q^*, que resulta

$$Q^* = \frac{1}{2\omega_1\omega_2}\left\{\omega_1^2\left[\omega_2^2 X^2(\tau) + \dot{X}^2(\tau)\right] + \left[\omega_2^2 Y^2(\tau) + \dot{Y}^2(\tau)\right]\right\} \tag{9}$$

d) Muestre que la función generadora $P(u, v)$ satisface la ley de la probabilidad total ($\sum_n p_{m,n}(\tau) = 1$), y que la misma es equivalente a pedir que $p(u, 1) = 1/(1 - u)$.

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

En el caso en el que la frecuencia no se mantiene constante pero la transformación entre ω_1 y ω_2 se lleva a cabo de manera infinitamente lenta, puede verse que se obtiene el mismo valor para Q^*. Una transformación adiabática, volviendo al caso clásico dado por la Ec. (3) (que ya sabemos que determina completamente el caso cuántico), implica que la acción del oscilador, dada por el cociente entre la energía y la frecuencia, se mantiene constante. En este tipo de procesos cuasiestáticos es posible definir dos invariantes adiabáticos,

$$\frac{\dot{X}^2(t) + \omega^2(t)X^2(t)}{\omega(t)} = \frac{1}{\omega_0} \qquad \text{y} \qquad \frac{\dot{Y}^2(t) + \omega^2(t)Y^2(t)}{\omega(t)} = \omega_0\,, \tag{10}$$

a partir de los cuales es fácil ver que en el caso adiabático se recupera el valor de Q^* para frecuencia constante y, por lo tanto, la regla de selección $p_{n,m}(\tau) = \delta_{n,m}$ que implica que no pueden ocurrir transiciones entre diferentes estados cuánticos, lo cual es otra expresión del teorema adiabático cuántico.

Cuando las transformaciones no son infinitamente lentas, sin embargo, uno puede considerar a Q^* como una medida de la adiabaticidad de la transformación. Para ver eso, vamos a calcular el valor medio y la varianza del número del ocupación del oscilador en su estado final, y ver cómo depende de Q^*.

f) Para una transición desde un estado inicial $|n\rangle$ a un estado final $|m\rangle$, el valor medio del número de ocupación del estado final $\langle m\rangle_n$ puede calcularse tomando la primera derivada de la función generadora $P(u,v)$. Encuentre su expresión como función de Q^*. Ayuda: escriba la derivada obtenida como su desarrollo en serie de potencias.

g) 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 inversa β, es:

$$\langle H(\tau)\rangle = \frac{\hbar\omega_2}{2}\, Q^* \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega_1}{2}\right). \tag{11}$$

Ayuda: la probabilidad de hallar al estado inicialmente en un autoestado $|n\rangle$ será $p_n(\beta) = \exp[-\beta E_n(0)]/\mathcal{Z}_0$.

h) Encuentre la varianza del número de ocupación en el estado final, si el estado inicial es $|n\rangle$. Verifique que efectivamente el parámetro Q^* controla la magntiud de dicha varianza, y que en el caso adiabático la misma se anula, mientras que en procesos rápidos no adiabáticos la varianza y el valor medio del número de ocupación aumentan con Q^*, indicando que el oscilador armónico termina en un estado cada vez más alejado de su estado inicial. Por esta razón a Q^* se lo llama **parámetro de adiabaticidad**.

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 $A \to B$ y $C \to D$ están caracterizadas por parámetros de adiabaticidad Q_1^* y Q_2^* respectivamente.

b) Escriba la primera ley de la termodinámica para cada tramo, y calcule el valor medio del trabajo y del calor transferido en cada tramo.

c) Encuentre qué condiciones deben cumplir los parámetros de adiabaticidad en cada tramo para que la máquina funcione como un motor térmico.

d) Encuentre la eficiencia de este motor térmico en función de las frecuencias, las temperaturas y los parámetros de adiabaticidad.

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, definida como

$$P = -\frac{\langle W_1 \rangle + \langle W_3 \rangle}{\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4} \,,$$

y su eficiencia a máxima potencia. En la ecuación anterior, $\langle W_1 \rangle$ es el trabajo medio en el tramo $A \to B$, y $\langle W_3 \rangle$ en el tramo $C \to D$.

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.

b) Calcule la eficiencia del motor a máxima potencia en función de las temperaturas para las condiciones del ítem anterior.

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]:

$$Q_{1,2}^* = \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2\omega_1\omega_2} \tag{12}$$

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

d) Repita los puntos *a)*, *b)* y *c)* en el límite cuántico en el cual la temperatura del baño frío es muy baja, mientras el baño caliente se mantiene a altas temperaturas.

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.