

# Proyecto Final: Métodos Computacionales

Alejandro Hernández A. - Nicolás Morales-Durán

July 21, 2015

## 1 Introducción

La ecuación de Langevin ha sido utilizada para el estudio de difusión y fenómenos fuera del equilibrio, entre otros [1]. Originalmente fue propuesta para estudiar el movimiento Browniano y en una aplicación más reciente se puede derivar una ecuación de Langevin para operadores de Heisenberg a partir de un sistema que está acoplado a un entorno de osciladores armónicos [2], de esa manera se pueden encontrar generalizaciones de ecuaciones de Heisenberg para una partícula cuántica Browniana y sistemas cuánticos abiertos.

En general, la interacción entre un sistema y su entorno no puede ser completamente ignorada, es entonces cuando se deben estudiar los llamados sistemas cuánticos abiertos [3], teoría que es de fundamental importancia en el estudio de la Física cuántica. Para realizar la tarea previamente mencionada existen varias aproximaciones como las ecuaciones de Schrödinger no lineales o el 'system-plus-bath-approach', que será la herramienta que utilizaremos para este proyecto, esto debido a que permite tomar el sistema total como cerrado y de esa manera utilizar las técnicas usuales de mecánica cuántica y además se basa en una aproximación microscópica que permite hacer un control experimental del sistema.

## 2 Desarrollo

Vamos a considerar la aproximación de Caldeira-Leggett [4] que consiste en modelar el entorno del sistema como un baño de osciladores armónicos. El Hamiltoniano del sistema total es entonces:

$$H_T = H_s + \frac{1}{2} \sum_i \left( \frac{p_i^2}{m_i} + m_i \omega_i^2 x_i^2 \right) + \sum_i \left( \frac{d_i^2 f^2(x)}{m_i \omega_i} - 2d_i f(x) x_i \right) \quad (1)$$

Donde  $x_i, p_i$  corresponden a las posiciones y momentos de los osciladores del baño;  $H_s$  es el Hamiltoniano del sistema en cuestión y  $f(x)$  es una función que nos da el acople entre el sistema y el baño, que es el último término de la Eq. (1). La idea acá es que, a pesar de que en la aproximación de Caldeira-Leggett el acople se toma lineal, nosotros vamos a

considerar un acople genérico para encontrar una versión generalizada de la ecuación de Langevin, esto debido a que existen sistemas en que este acople debe ser modelado como una función estrictamente no lineal. Ejemplos de acoples estrictamente no lineales aparecen en sistemas rotacionales que tunelan [5], en la descripción de moléculas quirales [6] o en tunelaje de cuasipartículas en sistemas Josephson [7]; por lo tanto vale la pena hacer el presente estudio.

A partir de este Hamiltoniano podemos obtener la siguiente ecuación de movimiento [8, 9]:

$$m\ddot{x} + \frac{\partial V(x)}{\partial x} + m f'(x(t)) \int_0^t \alpha(t-\tau) f'(x(t)) \dot{\tau} d\tau = f'(x(t)) \xi(t) \quad (2)$$

Donde  $\alpha(t)$  y  $\xi(t)$  vienen dados respectivamente por:

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \frac{1}{m} \sum_i \frac{d_i^2}{m_i \omega_i^2} \cos(\omega_i t) \\ \xi(t) &= - \sum_i d_i \left[ \left( x_i(0) + \frac{d_i}{m_i \omega_i^2} f(0) \right) \cos(\omega_i t) \right] - \sum_i d_i \left[ \frac{p_i(0)}{m_i \omega_i} \sin(\omega_i t) \right] \end{aligned}$$

La función  $\alpha(t)$  se conoce como el memory kernel y da cuenta de si el sistema es o no Markoviano, por otra parte  $\xi(t)$  se conoce como el noise term y se puede ver como una fuerza externa estocástica generada por el baño en que se encuentra el sistema.

La idea del presente trabajo es solucionar la ecuación (2) utilizando las herramientas aprendidas en el curso de Métodos Computacionales tanto para acoples lineales y no lineales como para los regímenes Markoviano (sistema sin memoria) y no-Markoviano (sistema con memoria). Esta última condición se obtiene cuando el memory kernel es una delta de dirac en el tiempo o una función distinta respectivamente. Para desarrollar la tarea en cuestión vamos a utilizar python y finalmente queremos analizar los resultados obtenidos y ver su sentido físico. Debido a que hay una gran cantidad de posibles sistemas a estudiar y diversos casos que considerar en cada sistema, restringiremos nuestro estudio sólo a determinadas situaciones que consideramos de interés.

## 2.1 Partícula Libre

En primer lugar y por simplicidad vamos a considerar el caso de una partícula libre cuyo entorno es un baño de osciladores. El Hamiltoniano de la partícula es entonces:

$$H_s = \frac{p^2}{2m} \quad (3)$$

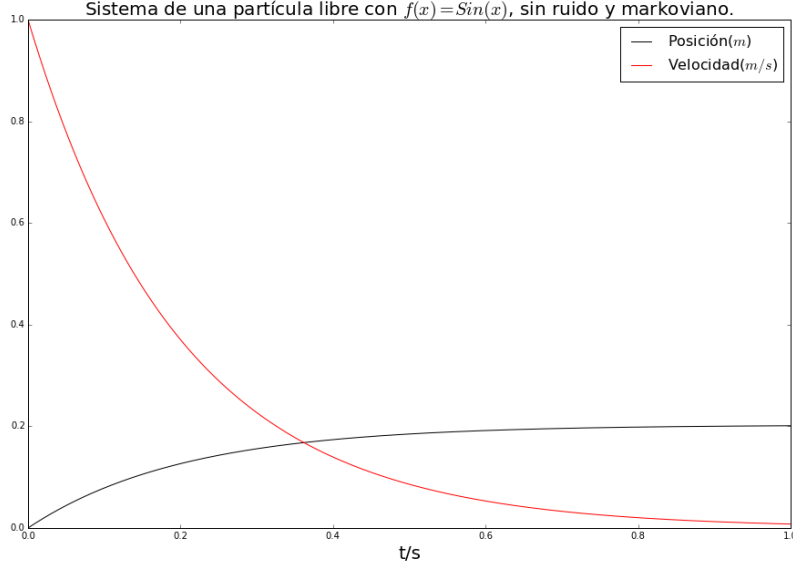


Figure 1:

Consideraremos primero el caso de la partícula libre con función de acople  $\sin(x)$ , sin ruido y en el régimen Markoviano, de lo cual obtenemos la ecuación:

$$m\ddot{x} + m\alpha \cos^2(x)\dot{x} = 0 \quad (4)$$

Al solucionar numéricamente esta ecuación en python obtenemos la gráfica Figure 1.

Esta situación es análoga al problema de Física 1 de una partícula en caída libre con resistencia del aire, donde hay una velocidad terminal y la posición tiende a cero. En este caso el hecho de tener un entorno sobre el sistema hace que su evolución se vea disipada. En adición a lo anterior, el hecho de tener un acople no lineal cambia fundamentalmente la situación, pues tenemos una posición terminal y la velocidad del sistema tiende a cero con el avance del tiempo, pero como se puede ver en el cuaderno este régimen cambia dependiendo del valor de  $\alpha$ .

Consideramos ahora una partícula libre con función de acople seno con ruido también sinusoidal y en régimen markoviano, obtenemos la siguiente ecuación:

$$m\ddot{x} + m\alpha \cos^2(x)\dot{x} = \cos(x)\xi(t) \quad (5)$$

Consideramos la función de ruido en dos casos,  $\xi(t) = \cos(t)$  y  $\xi(t) = \sin(t)$  para hacer una comparación. Estos dos casos deberían ser muy similares pues solo cambia el desfase

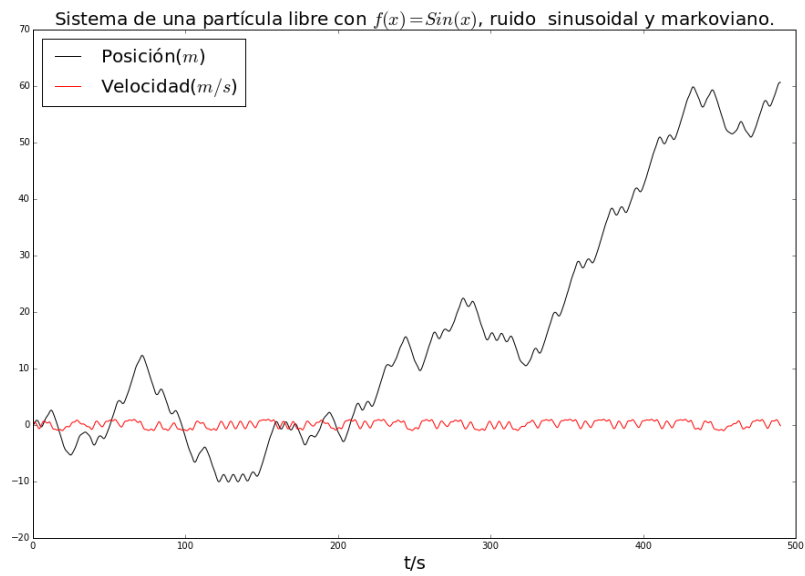


Figure 2:

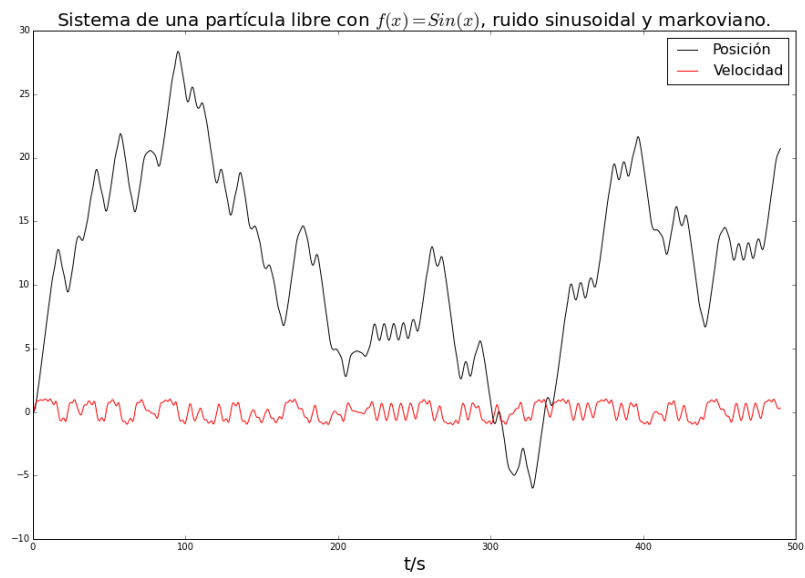


Figure 3:

de la función que estamos tomando como ruido generado por el baño de osciladores, el cual se puede ver como un forzamiento externo sobre el sistema. Vemos que la evolución ahora presenta un carácter oscilatorio debido al ruido pero que las soluciones discrepan en la medida en que la de ruido  $\xi(t) = \sin(t)$  se mantiene oscilando en cierto rango y la de ruido  $\xi(t) = \cos(t)$  se va al infinito después de cierto tiempo, entonces el ruido puede influir fuertemente en la evolución de los sistemas tratados, debido a que es equivalente a forzar externamente el sistema. Experimentalmente las condiciones del baño que dictan el ruido se pueden controlar.

Por otra parte vemos que las velocidades se mantienen prácticamente constantes, lo que nos llevaría a pensar que el ruido externo hace que la aceleración sea prácticamente nula, esta hipótesis se debe revisar considerando otros casos y de ser cierta hacer una correcta interpretación física de ella.

Ahora consideramos el caso anterior de una partícula libre, acople sinusoidal y markoviana pero con ruido exponencial. Hacemos distinción de los casos en que el ruido sea  $e^t$  y  $e^{-t}$ , descritos respectivamente por las siguientes ecuaciones de movimiento:

$$m\ddot{x} + m\alpha \cos^2(x)\dot{x} = \cos(x)e^t \quad (6)$$

$$m\ddot{x} + m\alpha \cos^2(x)\dot{x} = \cos(x)e^{-t} \quad (7)$$

Las soluciones para las ecuaciones anteriores se muestran a continuación, se grafican las posiciones y las velocidades con respecto al tiempo. En este caso vemos de nuevo que las evoluciones de la partícula difieren significativamente dependiendo de cuál sea la función de ruido que se está tomando, por lo que el ruido exponencial tiene influencia sobre el sistema.

En ambos casos se observa un amortiguamiento, pero para el primero la velocidad incrementa y varía significativamente con el tiempo mientras que en el segundo caso ésta tiende a cero, ya no es una constante como sucedía cuando los ruidos eran sinusoidales. Ese cambio abrupto de la velocidad se explica pues las oscilaciones en la posición son cada vez más cercanas en el tiempo y eso hace que  $\dot{x}$  varíe muy rápido.

Podemos decir que la posición del sistema con respecto al tiempo está regida por la función de acople que acompaña a la velocidad en la ecuación, pero la velocidad ahora depende del ruido estocástico generado por los osciladores del baño, pero éste no rige la aceleración del sistema en general.

Sistema de una partícula libre con  $f(x) = \sin(x)$ , ruido exponencial creciente y markoviano.

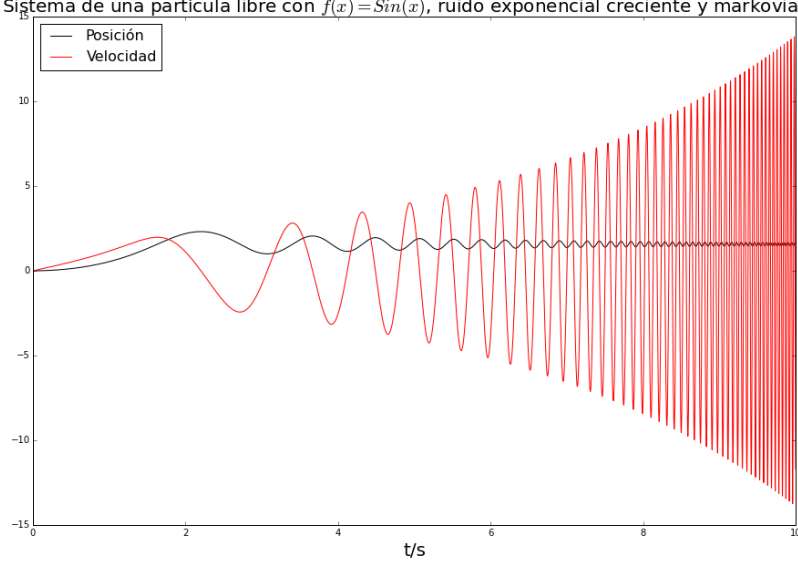


Figure 4:

Sistema de una partícula libre con  $f(x) = \sin(x)$ , con ruido exponencial decreciente y markoviano.

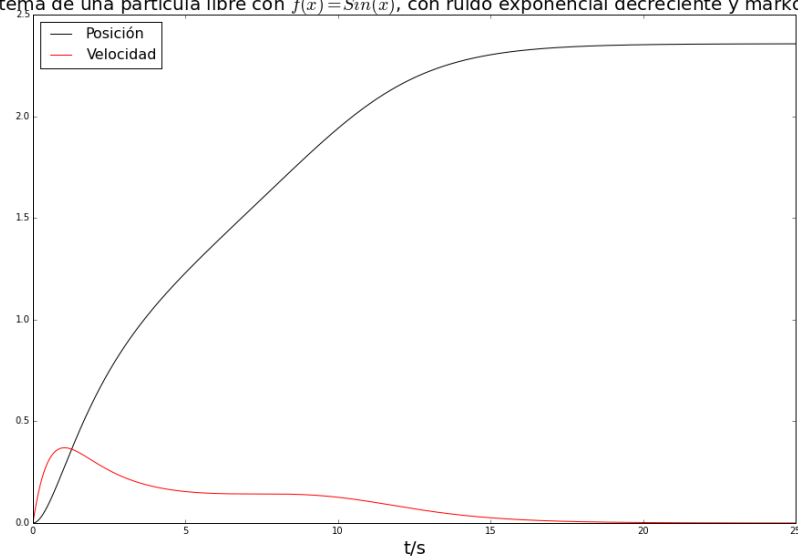


Figure 5:

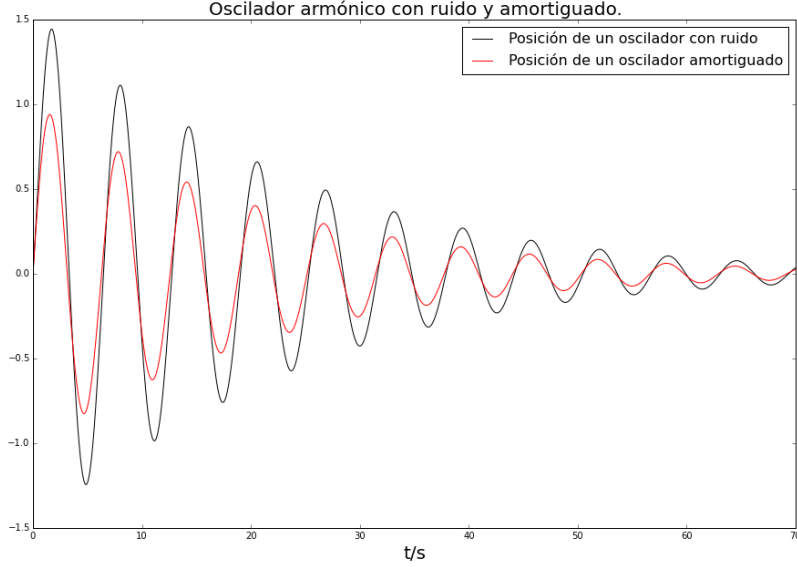


Figure 6:

## 2.2 Oscilador Armónico

Ahora consideremos un oscilador armónico abierto, el Hamiltoniano del oscilador es:

$$H_s = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (8)$$

Tendremos en cuenta el caso de un oscilador armónico con función de acople seno, sin ruido y en el régimen markoviano, obtenemos la siguiente ecuación de movimiento:

$$m\ddot{x} + m\omega^2 x + m\alpha \cos^2(x)\dot{x} = 0 \quad (9)$$

Además, consideraremos un oscilador armónico también con función de acople seno y markoviano pero con ruido, sistema descrito por la ecuación de movimiento:

$$m\ddot{x} + m\omega^2 x + m\alpha \cos^2(x)\dot{x} = \cos(x)e^{-t} \quad (10)$$

Al solucionar las ecuaciones anteriores y graficarlas conjuntamente obtendremos las curvas mostradas para las evoluciones de las posiciones de los osciladores (Figure 6). Podemos apreciar que ambos osciladores tienen un amortiguamiento en su evolución espacial debido al entorno en el que se encuentran, dependiendo del valor de la constante  $\alpha$  los osciladores serán subamortiguados, sobreamortiguados o críticamente amortiguados.

Vemos también la diferencia entre el caso con y sin ruido, pero apreciamos que el ruido exponencial externo generado por el baño de osciladores hace que el oscilador decaiga más lentamente hacia su estado base.

### 3 Conclusiones

Con la realización del proyecto pudimos evidenciar que efectivamente el hecho de que considerar un sistema cuántico abierto en el modelo de Caldeira-Leggett hace que haya una disipación en la evolución de dicho sistema. Este hecho se pudo predecir teóricamente debido a que la ecuación de movimiento presenta un término que va con la velocidad en todos los casos. Las simulaciones computacionales permitieron corroborar esto experimentalmente pues en las gráficas obtenidas para casos conocidos como la partícula libre o el oscilador armónico se puede apreciar la disipación.

Otro objetivo que se logró alcanzar fue el poder comparar los diferentes escenarios que se presentan en el marco de la ecuación generalizada de Schrödinger-Langevin tales como la comparación en el caso con y sin ruido y hacer un análisis de lo que cambia en la evolución del sistema, aunque en los casos estudiados este cambio no sea muy significativo.

Finalmente, se pudieron implementar algunas de las herramientas aprendidas en el curso tales como solucionar ecuaciones diferenciales por el método de Runge-Kutta y odeint, hacer animaciones, gráficas y aplicarlas a un problema físico en concreto que es de interés para nosotros haciendo el análisis pertinente.

### References

- [1] S. Chandrasekar, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 (1943).
- [2] M. D. Kostin, J. Chem. Phys. **57**, 3589 (1972).
- [3] M. Razavi, Classical and Quantum Dissipative Systems, Imperial College Press, London (2005).
- [4] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett **46**, 211 (1981).
- [5] K. H. Stevens, J. Phys. C. **16** (1983) 5765.
- [6] A. Dorta-Urra, H. C. Peñate-Rodriguez, P. Bargueño, G. Rojas-Lorenzo, S. Miret-Artés, J. Chem. Phys. **136** (2012) 174505.
- [7] V. Ambegaokar and U. Eckern, Z. Physik B **69**, 399 (1987).



- [8] P. Barguño, S. Miret-Artés, Ann. Phys. **346** (2014) 59.
- [9] A. F. Vargas N. Morales-Duran and P. Bargueño. Ann. Phys. **356** (2015), pp. 498-504.