

UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA
CENTRO UNIVERSITARIO DE CIENCIAS EXACTAS E INGENIERÍAS



Termodinámica del oscilador armónico pateado
clásico

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
LICENCIADO EN FÍSICA

P R E S E N T A

HUGO ALEXIS TORRES PASILLAS
Director: Dr. Thomas Gorin

Guadalajara, Jal. Méx

INVIERNO, 2020

Dedicatoria

AGRADECIMIENTOS

Resumen

Consideramos un sistema estadístico compuesto por partículas en un potencial de oscilador armónico acoplado a un reservorio térmico, sujeto a patadas periódicas. Mediante el uso de las ecuaciones clásicas se obtienen las trayectorias en el espacio de fase, primero suponiendo que la temperatura del reservorio es cero, y posteriormente considerando una temperatura mayor utilizando la ecuación de Langevin. Típicamente se estudian colecciones de trayectorias, lo cual permite considerar la función de distribución en el espacio de fase. El comportamiento de esta función es similar a su equivalente cuántico. Una vez que el sistema alcanza el cuasi-equilibrio, donde la energía disipada por el sistema en forma de calor es igual a la recibida por las patadas, se estudia la validez de la ley de Fourier para el sistema. Se comparan las distribuciones de las trayectorias de las partículas en el cuasi-equilibrio con las distribuciones de Boltzmann. Finalmente, se estudian 2 ciclos termodinámicos y se compararan con los del oscilador sin patadas.

Índice general

1. Introducción	1
2. Preliminares	4
2.1. Mecánica hamiltoniana	4
2.2. Termodinámica	5
2.3. Colectividad canónica	6
3. Marco teórico	8
3.1. Dinámica en el espacio de fase	8
3.1.1. Solución a la ecuación de Langevin	10
3.1.2. Efecto de las patadas	11
3.1.3. Dinámica del sistema	11
3.2. Interpretación termodinámica	12
3.3. Función de distribución del sistema	15
4. Resultados	17
4.1. Espacio de fase del sistema	17
4.2. Función de distribución del sistema	18
4.3. Coeficientes de Fourier	24
4.4. Comparación con la distribución de Boltzmann	27

Índice de figuras

3.1. Trayectoria en el espacio de fase del oscilador armónico pateado con y sin temperatura del entorno.	12
3.2. Espacio de fase para $\eta = 0.5$ y $\eta = 2.0$	12
4.1. Trayectoria de 700 osciladores armónicos pateados a partir de un estado inicial con distribución normal para distintos valores de κ . Las figuras a, b y c corresponden al sistema aislado y con el entorno a temperatura cero; d, e y f corresponden al sistema con el acoplamiento al reservorio y el entorno a temperatura cero; y g, h e i al sistema acoplado al reservorio con ($k_B T_e = 5$).	18
4.2. Función de distribución del sistema con $\kappa = -4.5$, $K_B T_e = 5$ y $\omega = 1$, antes y después de las patadas número 1, 5 y 35 en la primera, segunda y tercera fila, respectivamente.	19
4.3. Funciones de distribución antes y después de la patada 36 para el sistema con $k_B T_e = 5$ usando $\eta_{LD} = 1$ (superior) y $\eta_{LD} = 0.25$ (inferior), así como ajustes de las distribuciones a funciones sinusoides.	21
4.4. Parte superior: función de densidad del sistema clásico con la temperatura del reservorio $k_B T_e = 0$, y parte inferior: funciones de wigner del sistema cuántico con la temperatura del reservorio $k_B T_e = 5$, antes y después de la patada número 36, para $q = 4$, $\beta = 0.1$ y $\kappa = 4.5$	22
4.5. Parte superior: función de densidad del sistema clásico, y parte inferior: funciones de wigner del sistema cuántico, ambos con la temperatura del reservorio a $k_B T_e = 5$, antes y después de la patada número 36, para $q = 4$, $\beta = 0.1$ y $\kappa = 4.5$	23
4.6. Evolución de la energía para $\kappa = 4.5$ y $\beta = 0.1$, con el reservorio a temperatura 0. .	24

4.7. Coeficientes de Fourier para diferentes valores de κ y del coeficiente β de acoplamiento entre el sistema y el reservorio a temperatura cero. Las líneas horizontales corresponden a las aproximaciones analíticas dadas por $\alpha = 1/\beta$.	25
4.8. Evolución de la energía del sistema para $\beta = 0.2$ y $\kappa = 0.7$, con el reservorio a temperatura cero	25
4.9. Espacio de fase del sistema a) inicial, b) después de 35 patadas y c) después de 100 patadas para $\beta = 0.2$, $\kappa = 7.25$, con el reservorio a temperatura 0	26
4.10. Espacio de fase del sistema a) inicial, b) después de 1000 patadas y c) después de 1500 patadas para $\beta = 0.2$, $\kappa = 0.7$, con el reservorio a temperatura 0	26
4.11. Evolución de la energía para los valores de a) $\kappa = 2.5$ y b) $\kappa = 7.25$, con $\beta = 0.2$ y el reservorio a temperatura 0.	27
4.12. Coeficientes de la ley de Fourier para diferentes valores de β y κ , agregando una temperatura definida para el reservorio, $k_B T_e$. Las líneas horizontales corresponden a las predicciones analíticas dadas por $\alpha = 1/\beta$.	27
4.13. Histograma de la función de distribución del sistema durante la patada 40 (superior), y el porcentaje de diferencia con la distribución de Boltzmann en cada celda (inferior), para $\kappa = 2.0$, $\beta = 0.1$ y el reservorio con $k_B T_e = 5$.	28

Capítulo 1

Introducción

El oscilador armónico pateado es un sistema que ha sido estudiado anteriormente por varios autores en distintos regímenes. La dinámica de este sistema resulta de gran interés por varias razones: por un lado, su dinámica presenta islas de integrabilidad en el espacio de fase para ciertos parámetros, rodeadas por zonas en las que la dinámica es caótica [1]. Por otro, debido a la posibilidad de realizarse de manera experimental mediante una trampa armónica de átomos que interaccionan con láseres, en el que resulta posible controlar los parámetros del sistema[4]. Además, es uno de los pocos sistemas caóticos o mixtos (el único hasta donde conocemos), donde se tiene una ecuación maestra para describir el acoplamiento del sistema a un reservorio térmico, y esto no solo en el caso clásico sino también para el sistema cuántico [5].

El objetivo de estudio de este sistema ha sido variado: en el régimen clásico, su enfoque principal ha sido el estudio de su espacio de fase y las islas de integrabilidad que presenta [2, 3], mientras que en el régimen cuántico su estudio ha sido más variado, estudiando el sistema como un ejemplo de caos, su comportamiento al ser acoplado con un reservorio térmico, el entrelazamiento entre los estados del sistema, entre otros [1, 5, 7]. Así mismo, este sistema ha sido utilizado para el estudio de la transición entre el régimen clásico y el cuántico, debido a que es posible modificar la constante efectiva de Planck h_{eff} , mediante la modificación del parámetro de Lamb-Dicke [6]. E incluso se han realizado estudios experimentales del sistema [1, 5].

En 2003, Robert F. Mudde and all. realizaron un estudio de los osciladores armónicos pateados formados al poner burbujas en el fondo de un tubo en U lleno de agua, enfocándose en

las trayectorias que se formaban en su espacio de fase y el efecto de la fuerza de amortiguamiento. Más recientemente, en 2017 Miguel A. P. Reynoso et al. presentaron un artículo en el que estudian el sistema cuántico acoplado a un baño térmico, en diferentes regímenes entre la integrabilidad del sistema y el caos, concluyendo que la energía del sistema estaba regido por la ley de Fourier en los estados estacionarios. Así, surgen las siguientes dudas: ¿cómo podría hacerse una descripción termodinámica del sistema clásico análogo al presentado en [5]? y ¿qué similitudes habría entre ambos sistemas?

El principal objetivo de este trabajo es estudiar el sistema clásico análogo al sistema cuántico estudiado en [5]. De los dos efectos del entorno (dissipación y difusión), comenzamos despreciando el segundo término, lo que de cierta forma es equivalente a un sistema en contacto con un entorno a temperatura cero, para obtener el efecto de la fuerza de amortiguamiento en el espacio de fase del sistema. Posteriormente, consideramos también la temperatura del reservorio resolviendo la ecuación de Langevin, donde se agrega una fuerza aleatoria que modifica las trayectorias de las partículas, generando un movimiento browniano [8].

Debido al acoplamiento del sistema con el reservorio térmico, cada trayectoria del sistema se vuelve aleatoria, por lo que consideramos una colectividad con muchas trayectorias y estudiamos la estadística sobre esta. Por un lado podemos pensar en un gran número de átomos, todos siguiendo su propia trayectoria en el espacio de fase. Así, en un tiempo dado se tiene una distribución de puntos, la cual se puede describir con la función de distribución. Por otro lado podemos pensar en un solo sistema y la probabilidad de encontrarlo en un tiempo dado en cierto lugar del espacio de fase. Antes y después de cada patada, se encuentra esta función de distribución y se comparan con su equivalente en el régimen cuántico, las funciones de Wigner.

Al obtener la función de distribución antes y después de cada patada, presentamos la evolución de la energía promedio de las partículas durante las patadas, la cual llega a un estado estacionario donde la energía disipada al reservorio en forma de calor es la misma que la energía suministrada por las patadas. En estos estados estacionarios estudiamos si el intercambio de calor entre el sistema y el entorno cumple o no la ley de Fourier.

A continuación, comparamos la función de distribución antes y después de las patadas con las correspondientes distribuciones de Boltzmann analíticas para el oscilador armónico, utilizando

la divergencia de Kullback-Leibler (entre otros) para cuantificar las diferencias.

Finalmente, realizamos dos ciclos termodinámicos en los que utilizamos procesos con y sin patadas, con el que comparamos los procesos isotérmicos y adiabáticos del oscilador armónico con el sistema con patadas.

Capítulo 2

Preliminares

A continuación, introduciremos algunos de los conceptos utilizados durante este trabajo, siguiendo el libro “*Classical Mechanics*” de Jhon R. Taylor

2.1. Mecánica hamiltoniana

En la mecánica Lagrangiana, las ecuaciones de movimiento surgen del Lagrangiano, $L(q, \dot{q})$, que depende de las posiciones generalizadas q , de las velocidades generalizadas \dot{q} , y quizá del tiempo t , y corresponde a la energía cinética T menos la energía potencial U :

$$L(q, \dot{q}, t) = T - U. \quad (2.1)$$

Utilizando los momentos generalizados, dados por

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}, \quad (2.2)$$

se obtiene el Hamiltoniano, que es la función central en la formulación hamiltoniana, y está dado por:

$$H(p, q, t) = \sum_{i=1}^n p_i q_i - L, \quad (2.3)$$

el cual para varios sistemas corresponde a la energía total:

$$H(p, q, t) = T + U. \quad (2.4)$$

Las ecuaciones de movimiento del sistema se derivan de su hamiltoniano mediante las llamadas ecuaciones de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{y} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (2.5)$$

2.2. Termodinámica

Un sistema termodinámico consiste en una cantidad de materia suficientemente grande (en el sentido de que la cantidad de materia usualmente se cuenta en moles), delimitado por una superficie que separa al sistema de su ambiente o alrededores, que puede ser física o imaginaria.

Dependiendo del tipo de barrera que separe al sistema termodinámico de su alrededor, un sistema puede ser:

- **abierto**, si existe intercambio de materia entre el sistema y el ambiente
- **cerrado**, si la barrera no permite intercambio de materia con el ambiente
- **adiabático**, si no se permite conductividad de calor con el ambiente
- **aislado**, si no se permite ninguna interacción entre el sistema y el ambiente.

El estado de un sistema termodinámico está descrito por un conjunto de variables termodinámicas, y está completamente descrito por ellas, además no depende del estado pasado del sistema. Estas variables se escriben como,

$$X_1, X_2, X_3, \dots \quad (2.6)$$

Una función de estado es una propiedad física que depende solo del estado del sistema, y se expresa por,

$$F(X_1, X_2, X_3, \dots). \quad (2.7)$$

La termodinámica de un sistema obedece a las siguientes leyes, conocidas como leyes de la termodinámica:

- **Ley cero.** Si dos sistemas A y B se encuentran en equilibrio termodinámico con un tercer sistema C, entonces A y B se encuentran en equilibrio termodinámico entre sí, lo que permite definir una función de temperatura empírica.
- **Primera ley (conservación de la energía).** Para cada sistema, existe una variable termodinámica escalar extensiva llamada energía (U). Para el caso de un sistema cerrado,

$$dU = \delta W + \delta Q, \quad (2.8)$$

donde δU y δQ son el diferencial del trabajo y el calor, respectivamente, en los que se utiliza el símbolo δ para representar que no son diferenciales exactos.

- **Segunda ley.** No existe un proceso cíclico que tenga el único efecto de transferencia de calor de un cuerpo a temperatura T_1 a otro de temperatura T_2 , si $T_1 < T_2$. Lo que implica además que existe una variable termodinámica llamada entropía, denotada por S , y que en cualquier proceso termodinámico $\frac{\delta Q}{T} \leq dS$, donde T es un denominador integrante del calor.

2.3. Colectividad canónica

En la colectividad canónica se considera un sistema en contacto con un baño térmico a una temperatura controlada T , de manera que el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico con sus fronteras a una temperatura también T .

La función de distribución del sistema, que nos da la probabilidad de encontrar a una partícula de este en el estado (\vec{p}, \vec{q}) del espacio de fase, donde \vec{p} y \vec{q} son las posiciones y los momentos generalizados del sistema, respectivamente, está dada por:

$$\rho = \frac{1}{\Omega(T, \vec{X})} e^{\frac{H(\vec{p}, \vec{q})}{k_B T}}, \quad (2.9)$$

donde $H(\vec{p}, \vec{q})$ es el hamiltoniano del sistema y k_B es la constante de Boltzmann. La función $\Omega(T, \vec{X})$ es la constante de normalización de la función de distribución llamada función de partición de la colectividad canónica, que depende de la temperatura del reservorio T y las variables mecánicas del sistema, y está dada por

$$\Omega(T, \vec{X}) = \int \frac{dp_1 dp_2 \dots dq_1 dq_2 \dots}{h^N N!} e^{\beta H(\vec{p}, \vec{q})}, \quad (2.10)$$

donde N es el número de partículas que componen al sistema termodinámico y $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Las propiedades termodinámicas se pueden deducir a partir de esta función de partición:

- Energía interna

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Omega(T, \vec{X}). \quad (2.11)$$

- Diferencial de trabajo

$$\delta W = \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha=1}^K \frac{\partial}{\partial X_\alpha} \ln \Omega(T, \vec{X}) dX_\alpha. \quad (2.12)$$

- Entropía

$$S = \frac{U}{T} + k_B \ln \Omega(T, \vec{X}) \quad (2.13)$$

Capítulo 3

Marco teórico

El oscilador armónico pateado es un sistema físico cuya dinámica está descrita por el Hamiltoniano siguiente:

$$H = \omega\hbar \left[\frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2} \right] + \frac{\kappa}{\sqrt{2}\eta^2} \cos \left(\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \eta x \right) \sum_{n \in \mathbb{R}} \delta(t/\omega - n\tau_k), \quad (3.1)$$

donde se han tomado los parámetros para la posición, el momento y el tiempo como

$$x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X, \quad p = \frac{P}{\sqrt{\hbar m\omega}}, \quad \tau = \omega t, \quad (3.2)$$

siendo X y P la posición y el momento de la partícula en unidades físicas respectivamente, m su masa y ω la frecuencia del oscilador. El término κ es la llamada *fuerza de la patada adimensional*, η es el parámetro de Lamb-Dicke, y τ_k el periodo en el que actúa la patada, cuyo potencial corresponde al tercer término del hamiltoniano. \hbar es la constante de Planck y δ es la delta de Dirac.

3.1. Dinámica en el espacio de fase

Las trayectorias en el espacio de fase de este sistema corresponden a las del oscilador armónico, mientras que durante el efecto de las patadas, cada tiempo $t = n\tau_k$, las partículas cambian instantáneamente su momento pero mantienen la misma posición, cambiando a otra trayectoria del oscilador armónico de energía distinta.

Sin embargo, al considerar el sistema acoplado a un reservorio térmico ya no es posible encontrar las ecuaciones de movimiento mediante un hamiltoniano, debido al intercambio de energía del sistema con el reservorio. En su lugar, encontramos las trayectorias resolviendo la ecuación de Langevin, dada por:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\gamma}{m} \frac{dx}{dt} + \omega^2 x = \frac{1}{m} \eta_T, \quad (3.3)$$

donde γ es el coeficiente de acoplamiento entre el sistema y el reservorio, y η_T es una fuerza aleatoria que actúa sobre la partícula debido a la temperatura del entorno con una distribución normal, provocando un movimiento browniano, dada por:

$$\langle \eta_T(t) \eta_T(t') \rangle = 2\gamma k_B T_e \delta(t - t'), \quad (3.4)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, T_e es la temperatura del reservorio, y el término $\delta(t - t')$ indica que la fuerza aleatoria se supone independiente para cada tiempo.

Al tomar las variables en (3.2), la ecuación de Langevin (3.3) queda escrita como:

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} + \frac{\gamma}{m\omega} \frac{dx}{d\tau} + x = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \eta_T. \quad (3.5)$$

Durante el efecto de las patadas podemos despreciar el efecto del reservorio térmico durante un intervalo de tiempo arbitrariamente pequeño, debido a que la fuerza es instatánea, por lo que el efecto de las patadas se puede encontrar a partir del hamiltoniano del sistema original de la ecuación (3.1).

Consideramos una colección estadística de trayectorias, de forma que en cada instante de tiempo t estas nos dan una distribución de estados en el espacio de fase correspondiente a la función de distribución del sistema, que corresponde a una densidad de probabilidad de encontrar una partícula en cierto lugar del espacio de fase, la cual se vuelve quasi-estacionaria para tiempos suficientemente grandes. Esta función de distribución se compara con su equivalente cuántico.

3.1.1. Solución a la ecuación de Langevin

Para encontrar la solución de la ecuación de Langevin en (3.5), comenzamos escribiendo dicha ecuación diferencial como un sistema de ecuaciones de primer orden:

$$\begin{bmatrix} x \\ p \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -\frac{\gamma}{m\omega} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \eta_T \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

El término η_T de la fuerza aleatoria debido a la temperatura se obtiene a partir de la ecuación (3.4). Introduciendo la variable aleatoria x_j con distribución normal y varianza $\langle x_j^2 \rangle = 1$, podemos escribir dicha ecuación como

$$\langle \eta_T(t)x(t)\eta_T(t')x(t') \rangle = 2\gamma k_B T_e \delta(t-t'), \quad (3.7)$$

integrando en ambos lados, obtenemos:

$$\eta_T^2 x_j^2 \Delta t = 2\gamma k_B T. \quad (3.8)$$

Por lo tanto, el término de la patada aleatoria es

$$\eta_T^2 = \frac{2\gamma k_B T}{\Delta\tau}. \quad (3.9)$$

Utilizando el método numérico de Euler-Maruyama para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas, la ecuación de Langevin puede ser resuelta por

$$\begin{bmatrix} x \\ p \end{bmatrix}'_{n+1} = \begin{bmatrix} x \\ p \end{bmatrix}_n + \Delta\tau \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ p \end{bmatrix}_n + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{\omega} \sqrt{2\beta \frac{k_B T}{\hbar} \Delta t} \end{bmatrix}, \quad (3.10)$$

donde se ha definido el término $\beta = \frac{\gamma}{m\omega}$, el cual tomaremos como constante. El intervalo τ_k durante el que se resuelve esta ecuación se ha dividido en N subintervalos iguales $\Delta\tau = \tau_k/N$, y el subíndice en los vectores columna del punto en el espacio de fase corresponden al estado después de ese subintervalo.

3.1.2. Efecto de las patadas

Durante el efecto de las patadas podemos despreciar la temperatura del entorno debido a que esta fuerza es instantánea, por lo que utilizamos el hamiltoniano del oscilador armónico pateado dado por la ecuación (3.1). Utilizando las ecuaciones de Hamilton para el momento, obtenemos:

$$\dot{p} = -\hbar\omega x + \frac{\kappa}{\eta} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sin \left[\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_k}} \eta x \right] \sum_n \delta(t - n\tau_k). \quad (3.11)$$

Resolvemos esta ecuación durante el intervalo de tiempo $t = n\tau_k - \epsilon$ a $t = n\tau_k + \epsilon$ con ϵ arbitrariamente pequeño y tomamos el límite $\epsilon \rightarrow 0$, con lo que obtenemos el cambio de la n -ésima patada:

$$\Delta p = \frac{\kappa}{\eta} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sin \left(\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \eta x \right). \quad (3.12)$$

Por lo tanto, el estado justo después de la patada es

$$(x_n, p_n) = (x'_n, p'_n + \frac{\kappa}{\eta} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sin \left(\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \eta x \right)), \quad (3.13)$$

donde x'_n y p'_n son la posición y el momento de la partícula justo antes de la n -ésima patada.

3.1.3. Dinámica del sistema

La figura 3.1 muestra una trayectoria en el espacio de fase del oscilador armónico pateado, con el reservorio a temperatura cero y con el reservorio a temperatura finita, $k_B T_e = 5$.

A partir del punto (x_n, p_n) en el espacio de fase del sistema justo antes de la n -ésima patada, calculamos el estado (x'_{n+1}, p'_{n+1}) justo después de la patada n utilizando la ecuación (3.5), y posteriormente utilizamos el hamiltoniano del oscilador armónico pateado en la ecuación (3.1) para aplicar el efecto (instantáneo) de la patada, obteniendo el punto (x_{n+1}, p_{n+1}) en el espacio de fase, correspondiente al estado del sistema justo antes de la patada $n + 1$.

La dinámica del sistema queda determinado por la fuerza de las patadas κ , la relación entre las dos frecuencias del sistema $q = \frac{\omega_k}{\omega}$, donde ω es la frecuencia del oscilador y ω_k es la frecuencia

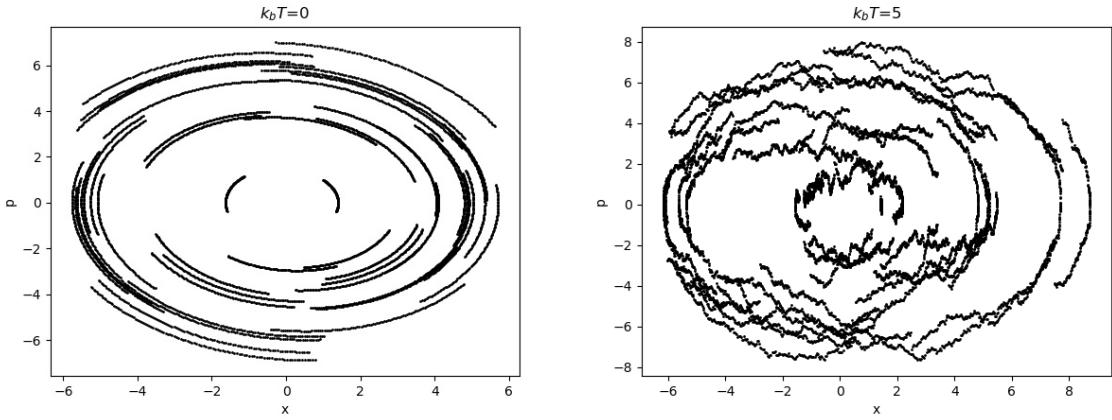


Figura 3.1: Trayectoria en el espacio de fase del oscilador armónico pateado con y sin temperatura del entorno.

de las patadas, y el coeficiente de acoplamiento del sistema con el reservorio β , mientras que el parámetro η nos da únicamente un re-escalamiento del espacio de fase [9] como se muestra en la figura 3.2.

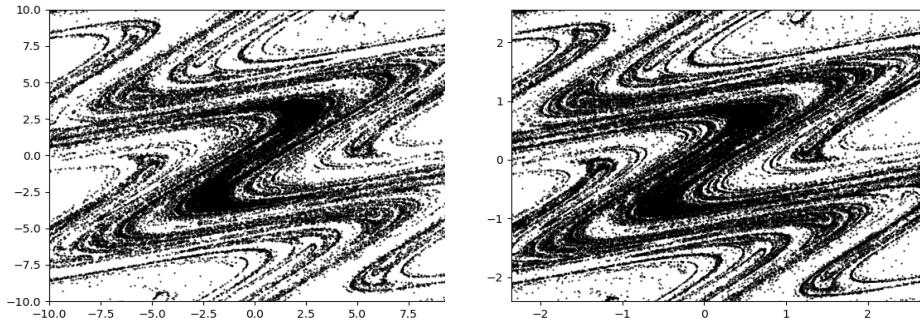


Figura 3.2: Espacio de fase para $\eta = 0.5$ y $\eta = 2.0$

3.2. Interpretación termodinámica

A partir del mapa del espacio de fase obtenido anteriormente, podemos encontrar la energía promedio de las partículas mediante el promedio de la energía cinética y potencial de cada una de ellas en la n -ésima patada,

$$\langle E(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \omega \left(\frac{p_j^2}{2} + \frac{q_j^2}{2} \right), \quad (3.14)$$

donde p_j y q_j son las coordenadas de posición y el momento de cada partícula.

Y de esta forma, podemos encontrar la evolución temporal de la energía en cada patada. Sin embargo, el sistema tiene dos energías promedio en cada patada, una justo antes y la otra justo después de cada una de ellas.

Si después de un número N_e de patadas el sistema logra llegar a un punto de cuasi-equilibrio entre la energía disipada por el efecto del amortiguamiento y la energía suministrada por las patadas, podemos calcular el promedio de la energía del sistema antes y después de las patadas en este estado como

$$\langle E \rangle_b = \frac{1}{N_k - N_e} \sum_{n=N_e}^{N_k} \langle E_b(n) \rangle \quad (3.15)$$

$$\langle E \rangle_a = \frac{1}{N_k - N_e} \sum_{n=N_e}^{N_k} \langle E_a(n) \rangle, \quad (3.16)$$

donde $\langle E \rangle_b$ y $\langle E \rangle_a$ son el promedio de la energía sobre el tiempo en el estado de equilibrio antes y después de las patadas, respectivamente, N_e es el número de patadas del sistema al alcanzar el cuasi-equilibrio y N_k es el número total de patadas, con $N_e < N_k$, y $\langle E_b(n) \rangle$ y $\langle E_a(n) \rangle$ son las energías del sistema antes y después de la n -ésima patada, respectivamente.

La energía promedio total del sistema en el cuasi-equilibrio la podemos obtener con los dos resultados anteriores como

$$\langle E \rangle = \frac{\langle E \rangle_b + \langle E \rangle_a}{2}. \quad (3.17)$$

Además, podemos encontrar la cantidad de energía disipada entre dos patadas consecutivas mediante la resta del promedio de la energía del sistema antes y después de las patadas

$$\Delta E = \langle E \rangle_a - \langle E \rangle_b. \quad (3.18)$$

Para el oscilador armónico unidimensional, la relación entre la energía interna U y la temperatura está dada por

$$U = N K_B T \quad (3.19)$$

donde N es el número de partículas del sistema y k_B es la constante de Boltzman [10]. Utilizando la energía promedio del sistema obtenida de forma numérica, la relación entre la temperatura y la energía del sistema es

$$\langle E \rangle = k_B T \quad (3.20)$$

La conducción de calor entre un sistema y su entorno viene dada por la ley de Fourier

$$\frac{Q}{t} = a(T_1 - T_2), \quad (3.21)$$

donde Q/t es el calor transmitido por unidad de tiempo, a es el coeficiente de Fourier y $(T_1 - T_2)$ es la diferencia de temperatura entre la fuente caliente y fría [11]. Consideramos la tasa de flujo de calor como la razón entre la energía disipada entre dos patadas dividida por el periodo de las patadas:

$$\frac{Q}{t} = \frac{\Delta E}{\tau_k}, \quad (3.22)$$

por lo que la ley de Fourier para el sistema queda expresada como

$$\alpha \frac{\Delta E}{\tau_k} = \langle E \rangle - k_B T_e, \quad (3.23)$$

donde α es el coeficiente de Fourier que nos da la constante de proporcionalidad entre ambas cantidades. El caso límite del sistema aislado se obtiene al tomar $T_e = 0$.

A partir de la aproximación de la energía en el oscilador armónico amortiguado [12], para $2\beta \ll \omega$, dada por

$$E \approx \frac{1}{2} m A^2 \omega^2 e^{-2\beta t}, \quad (3.24)$$

encontramos la tasa de disipación de energía entre dos patadas consecutivas como

$$\begin{aligned}\frac{\Delta E}{\tau_k} &\approx \dot{E} \\ &\approx -2\beta E.\end{aligned}\tag{3.25}$$

Consideramos el flujo de energía del sistema al reservorio, por lo que utilizamos el signo positivo. Combinando las ecuaciones (3.23) y (3.25) obtenemos

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2\beta} \frac{\Delta E}{\tau_k}. \tag{3.26}$$

Sin embargo, al considerar también la temperatura del entorno, debemos restar la energía de este, por lo que obtenemos, finalmente

$$\langle E \rangle - k_B T_e = \frac{1}{2\beta} \frac{\Delta E}{\tau_k}. \tag{3.27}$$

Al comparar la ecuación (3.23) con esta última aproximación analítica, obtenemos la siguiente expresión para los coeficientes de Fourier:

$$\alpha = \frac{\langle E \rangle - k_B T_e}{\Delta E / \tau_k} \approx \frac{1}{\beta}. \tag{3.28}$$

3.3. Función de distribución del sistema

En un sistema termodinámico, la función de distribución que tiene el sistema corresponde a la distribución de Boltzmann:

$$P_B = A e^{-\frac{H(x,p)}{k_B T}}, \tag{3.29}$$

donde $H(x, p)$ es el hamiltoniano del sistema y A es la constante de normalización [10]. Para este sistema, consideramos el hamiltoniano del oscilador armónico,

$$H(x, p) = \frac{1}{2} \omega(p^2 + q^2), \tag{3.30}$$

mientras que $k_B T = \langle E \rangle$ es la energía promedio del sistema. Por lo tanto, la distribución de Boltzmann para el sistema es:

$$P_B(x, p) = A e^{\frac{-\omega(p^2 + q^2)}{2\langle E \rangle}}. \quad (3.31)$$

Consideramos el error de la distribución del sistema obtenida como el porcentaje de diferencia con la distribución de Boltzmann, de manera que un 0 % indica que las distribuciones son completamente iguales, y un 100 % que son completamente distintas:

$$\text{Err} = \frac{|P_B(x, p) - Q(x, p)|}{P_B(x, p)} \times 100 \%, \quad (3.32)$$

donde $Q(x, p)$ corresponde al histograma normalizado de la función de distribución del sistema, y $P_B(x, p)$ es la distribución de Boltzmann.

Sin embargo, puede resultar más conveniente desde el punto de vista termodinámico comparar las distribuciones mediante la divergencia de Kullback-Leibler, para obtener una medida de similitud entre la distribución del sistema P con la de Boltzmann para el oscilador armónico Q , dada por:

$$D_{\text{KL}}(P||Q) = \sum_i P(i) \log \left(\frac{P(i)}{Q(i)} \right). \quad (3.33)$$

Capítulo 4

Resultados

Para lo siguiente, utilizaremos los parámetros del el sistema $\beta = 0.1$, $\omega = 1$, $k_B T_e = 5$ y $q = 4$ para el acoplamiento del sistema y el reservorio, la frecuencia del oscilador armónico, la temperatura del reservorio, y la razón entre la frecuencia del osciador con las patadas, respectivamente, a menos de que se especifiquen valores diferentes.

4.1. Espacio de fase del sistema

En la figura 4.1 se muestran los resultados del espacio de fase para $q = 4$ y distintos valores de κ , con 500 trayectorias durante un tiempo de 700s, para el sistema aislado (a, b y c), con el reservorio a temperatura cero (d, e y f), y para un entorno con $k_B T = 5$ (g, h, i).

Para el caso del sistema aislado, $\beta = 0$, donde no hay un acoplamiento con el reservorio (a, b y c en la figura 4.1), el sistema presenta islas de integrabilidad en el espacio de fase cuando la patada es pequeña, las cuales se extienden por todo el espacio formando patrones con ciertas simetría, rodeadas por zonas caóticas que cuales se van destruyendo a medida que se aumentan las patadas pasando a tener una distribución más uniforme. Sin embargo, al incluir el acoplamiento (d, e y f en las figuras 4.1), estas islas desaparecen convirtiéndose en atractores. Para valores de κ pequeños se mantiene una simetría similar al caso anterior. En cambio, para valores mayores de κ el efecto del amortiguamiento domina sobre el sistema, haciendo que los estados se distribuyan de manera semejante a una oscilación, y no uniformemente como sucedía en el caso sin amortiguamiento.

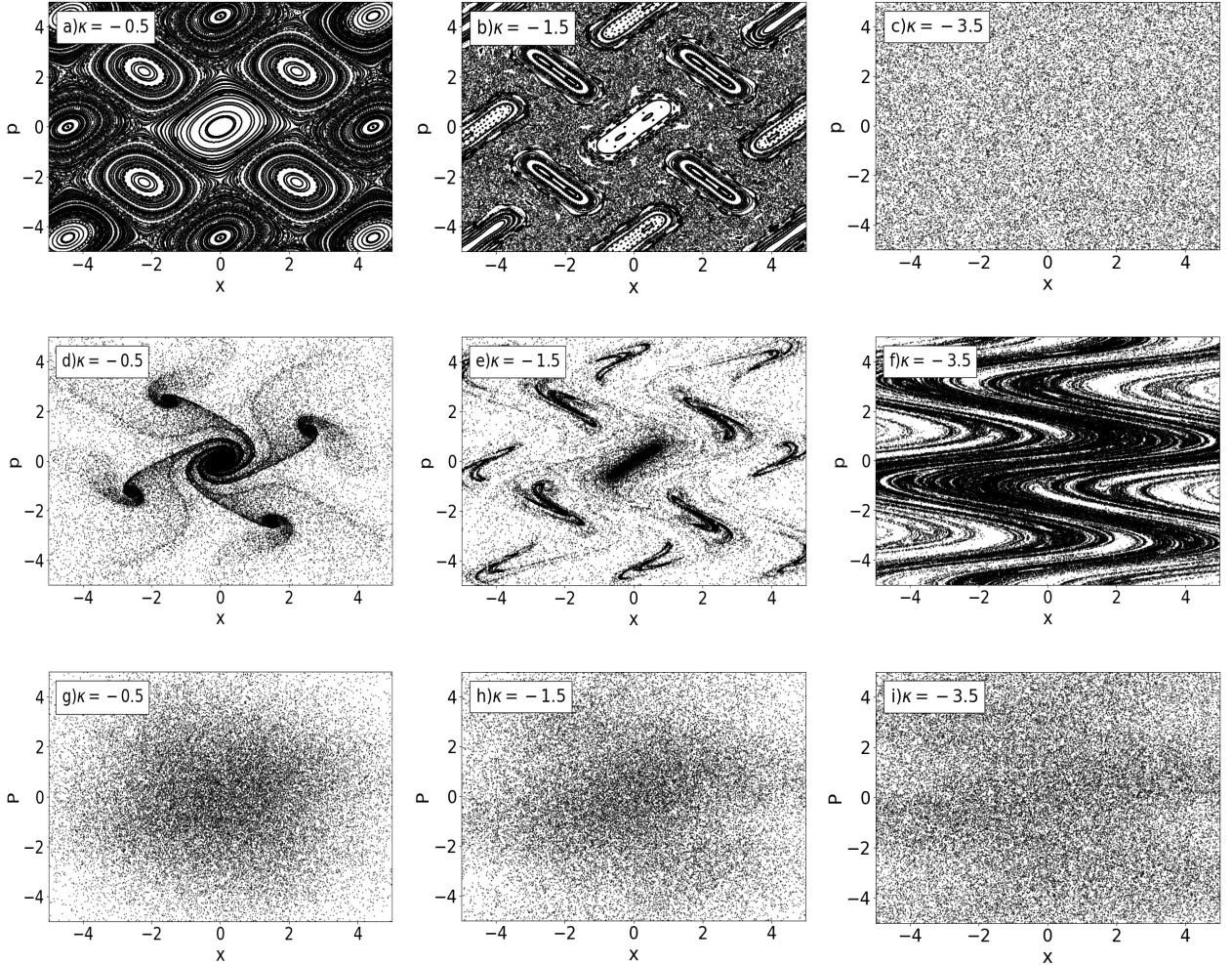


Figura 4.1: Trayectoria de 700 osciladores armónicos pateados a partir de un estado inicial con distribución normal para distintos valores de κ . Las figuras a, b y c corresponden al sistema aislado y con el entorno a temperatura cero; d, e y f corresponden al sistema con el acoplamiento al reservorio y el entorno a temperatura cero; y g, h e i al sistema acoplado al reservorio con ($k_B T_e = 5$).

Al incluir la temperatura del reservorio (g, h e i en las figura 4.1), el sistema se vuelve completamente caótico para cualquier valor de las patadas y la distribución de las trayectorias se vuelve más uniforme.

4.2. Función de distribución del sistema

La figure 4.2 muestra la función de distribución del sistema para un sistema con $\kappa = -4.5$, $k_B T_e = 5$ antes y después de la patada 1, 5 y 35 (en cada fila respectivamente). Una vez que el sistema llega al punto de quasi-equilibrio, dichas funciones se mantienen iguales antes y después

de cada patada. A diferencia de las figuras mostradas en la figura 4.1, en este caso solo se muestra el estado instantáneo del sistema.

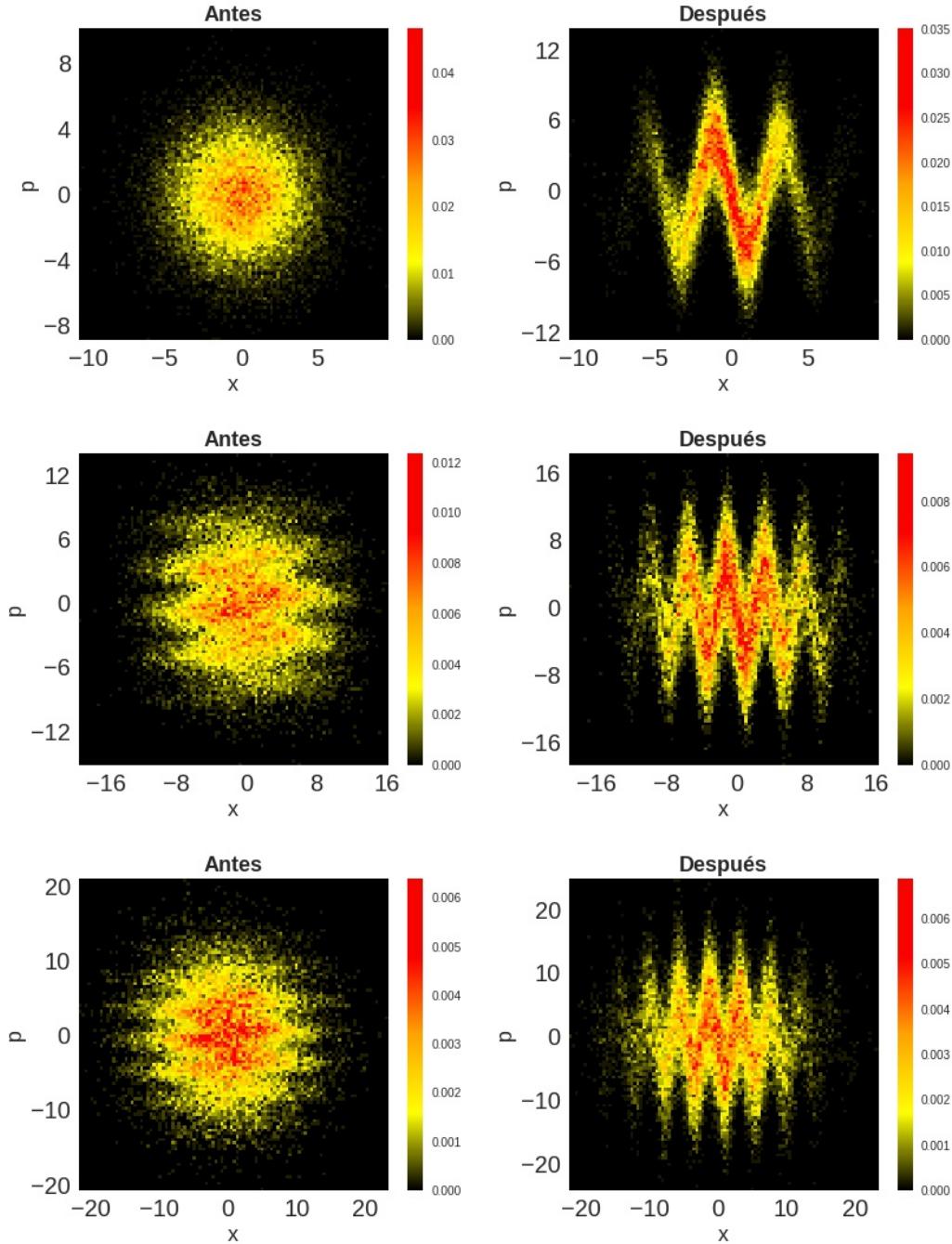
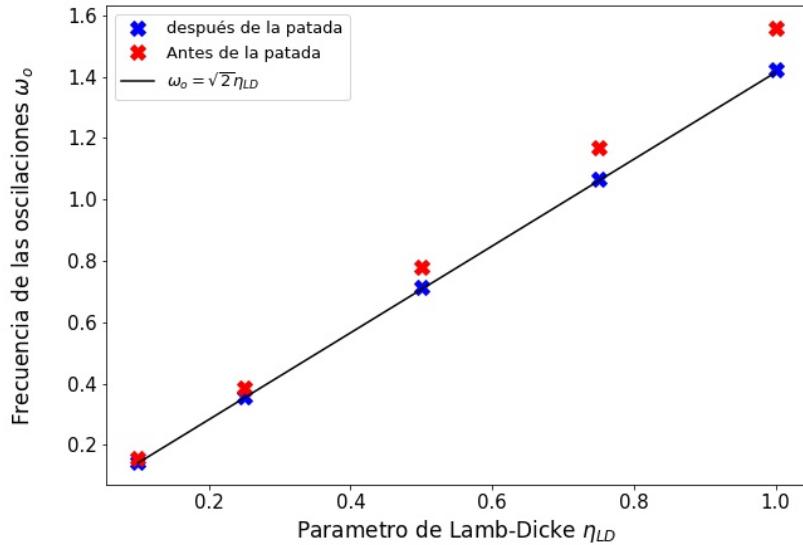


Figura 4.2: Función de distribución del sistema con $\kappa = -4.5$, $K_B T_e = 5$ y $\omega = 1$, antes y después de las patadas número 1, 5 y 35 en la primera, segunda y tercera fila, respectivamente.

Las oscilaciones que aparecen en las funciones de distribución del sistema después de la patada se deben al efecto de esta, la cual depende del seno de la posición x ; durante el tiempo entre las patadas, el efecto del oscilador armónico es una rotación del espacio de fase, por lo



que justo antes de la siguiente patada las oscilaciones aparecen en una dirección distinta. Para este caso, la rotación es de $\frac{\pi}{2}$ rad debido al parámetro $q = 4$.

Al variar el parámetro de Lamb-Dicke, el único efecto sobre el sistema es un reescalamiento de la función de distribución del sistema como se muestra en la figura 4.3 para los valores $\eta_{LD} = 1$ y $\eta_{LD} = 0.25$. Las oscilaciones en el espacio de fase antes de la patada está dada por $\omega_o = \sqrt{2}\eta_{LD}$ debido al potencial de la patada que aparece en el hamiltoniano (3.1) del sistema. En cambio, justo antes después de las patadas esta frecuencia ya no coincide exactamente con este valor, sino que es un poco mayor, mostrado en la figura 4.2.

La figura 4.3 muestra también los ajustes a funciones sinusoides (en azul), las cuales se obtienen dividiendo p y x (para antes y después de la patada, respectivamente) en intervalos pequeños, realizando promedio en cada intervalo de x y p , respectivamente, y haciendo ajustes a una función de tipo $f(x) = A \sin(\omega x + \phi)$.

Para comparar las distribuciones clásicas con las funciones de Wigner publicadas en [13], consideramos la función de distribución del sistema en el estado de cuasi-equilibrio del sistema, antes y después de la patada 36, para 100000 trayectorias.

La figura 4.4 muestra dicha función para el sistema acoplado al reservorio a temperatura cero (superior), y las funciones de Wigner del sistema cuántico a la temperatura $k_B T_e = 5$ (inferior). En ambos casos, antes y después de la patada, podemos observar que la función de

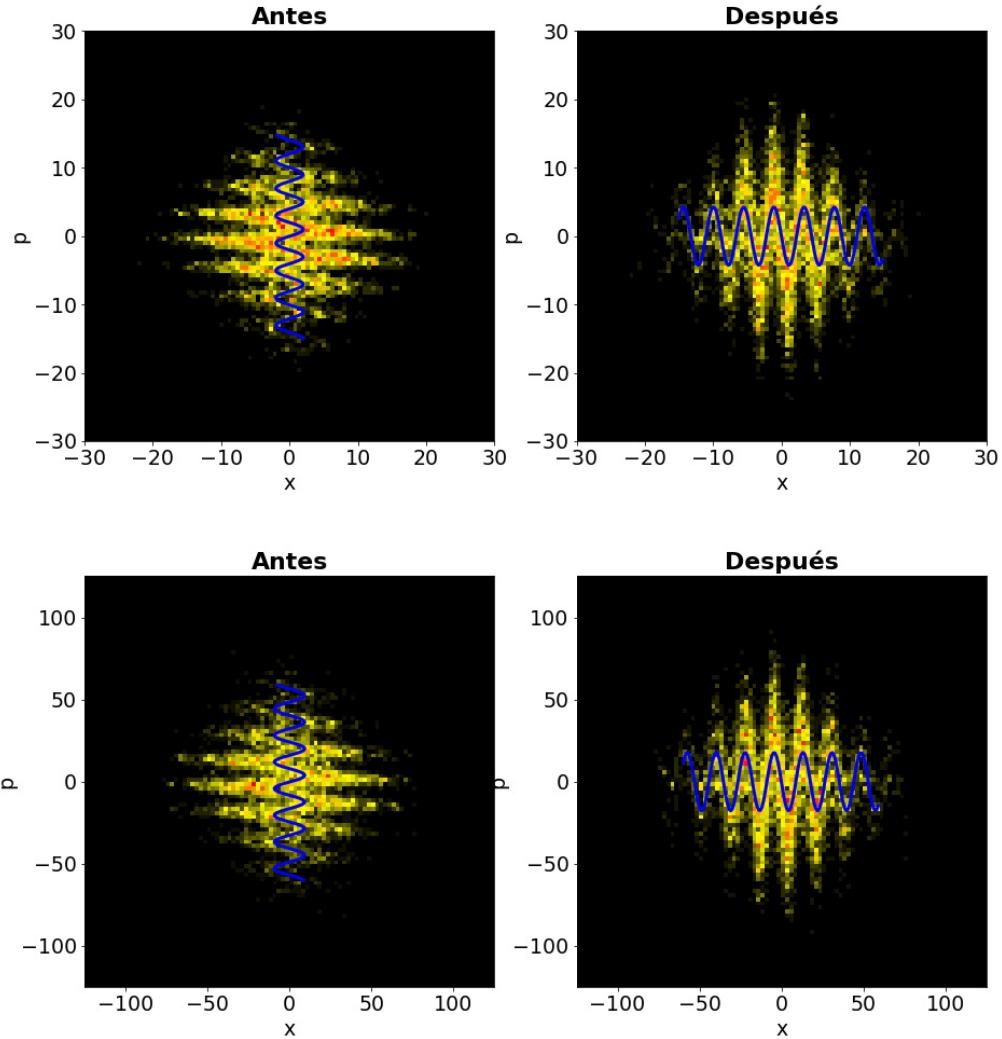


Figura 4.3: Funciones de distribución antes y después de la patada 36 para el sistema con $k_B T_e = 5$ usando $\eta_{LD} = 1$ (superior) y $\eta_{LD} = 0.25$ (inferior), así como ajustes de las distribuciones a funciones sinusoides.

distribución del sistema clásico tiene cierta similitud con las funciones de Wigner del sistema cuántico, con las distribuciones de manera ondulatoria en las mismas direcciones y centradas en el origen, pero presentan varias diferencias, en parte debido a que la temperatura del reservorio en el sistema clásico es cero, mientras que en el caso cuántico no.

Consideramos ahora la temperatura del reservorio con $k_B T_e = 5$, el mismo valor considerado en [13]. La figura 4.5 muestra nuevamente las funciones de Wigner obtenidas del sistema cuántico (inferior) y la función de distribución del sistema clásico (superior), antes y después de la patada 36.

En este caso, al utilizar la misma temperatura que el utilizado en el caso cuántico observamos

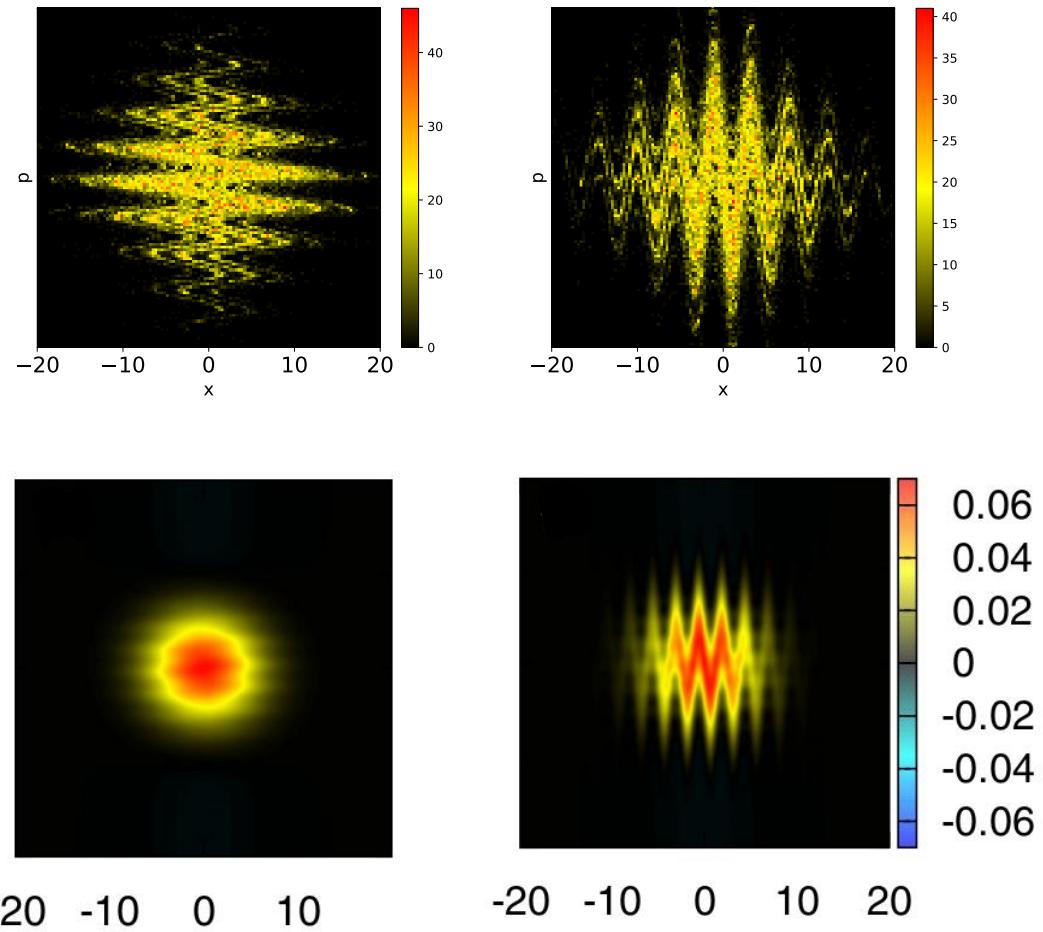


Figura 4.4: Parte superior: función de densidad del sistema clásico con la temperatura del reservorio $k_B T_e = 0$, y parte inferior: funciones de wigner del sistema cuántico con la temperatura del reservorio $k_B T_e = 5$, antes y después de la patada número 36, para $q = 4$, $\beta = 0.1$ y $\kappa = 4.5$

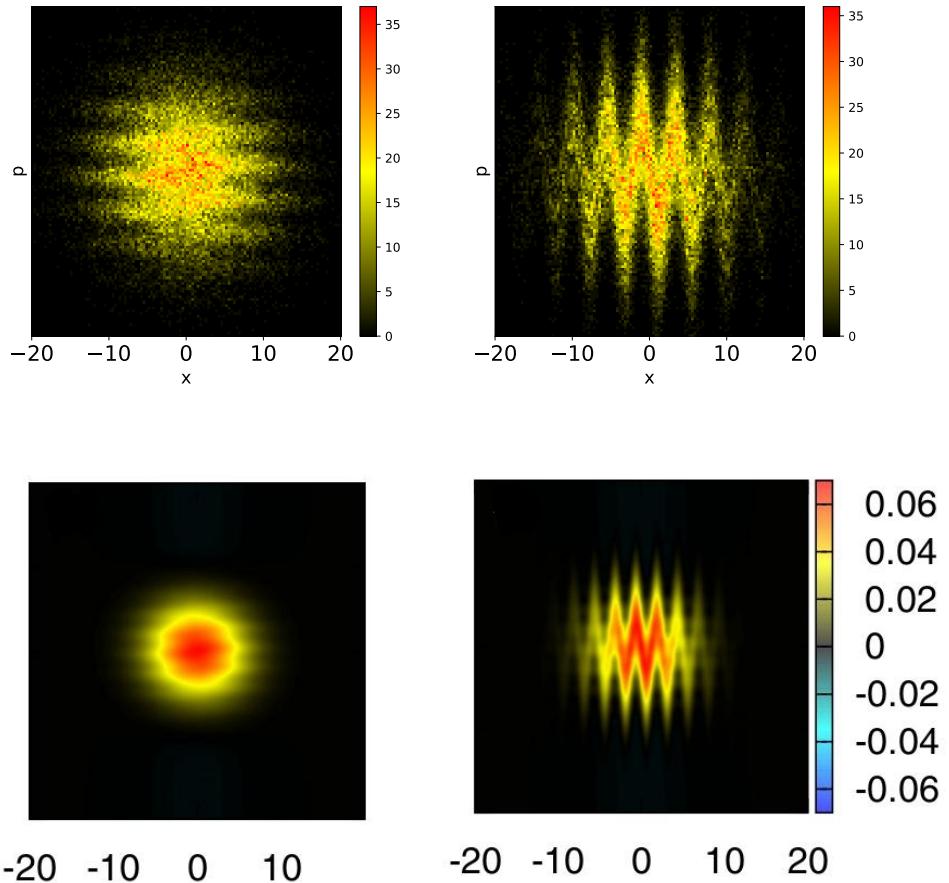


Figura 4.5: Parte superior: función de densidad del sistema clásico, y parte inferior: funciones de wigner del sistema cuántico, ambos con la temperatura del reservorio a $k_B T_e = 5$, antes y después de la patada número 36, para $q = 4$, $\beta = 0.1$ y $\kappa = 4.5$

que la similitud entre los dos casos es mayor que en el caso anterior con la temperatura del reservorio en cero: nuevamente, el espacio de fase muestra una distribución semejante a una ondulación en las mismas direcciones y centrada en el origen, sin embargo existen diferencias entre ambas distribuciones, especialmente en la escala de las funciones: en el caso cuántico, los valores no nulos de las funciones de Wigner se encuentran aproximadamente en los valores de x y p en el rango $[-10, 10]$, mientras que en el caso clásico estos mismos valores están aproximadamente en el rango $[-20, 20]$

4.3. Coeficientes de Fourier

Después de un cierto número de patadas, el sistema llega a un estado de quasi equilibrio entre la energía recibida por las patadas y la energía cedida al reservorio en forma de calor, de manera que la energía promedio antes y después de las patadas es constante, tal como sucede en el caso cuántico (figura 4.6).

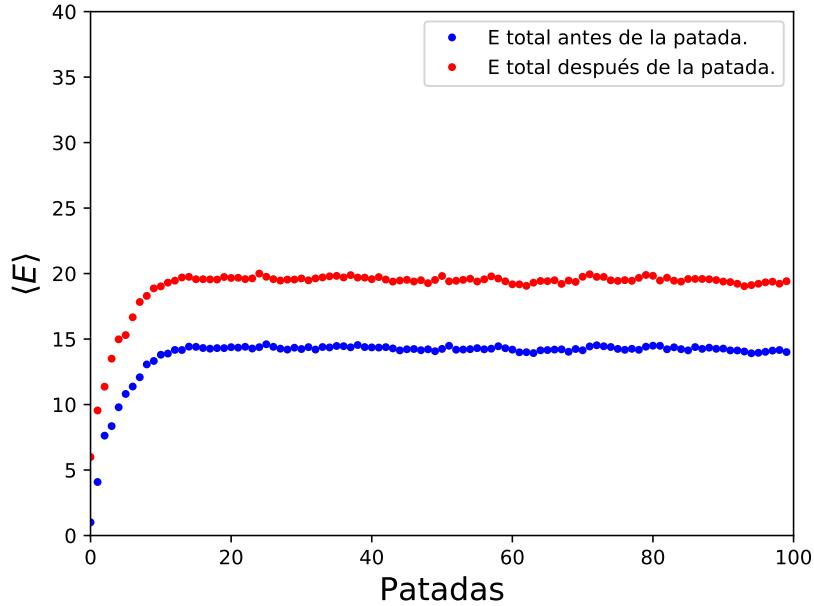


Figura 4.6: Evolución de la energía para $\kappa = 4.5$ y $\beta = 0.1$, con el reservorio a temperatura 0.

La figura 4.7 muestra los valores de los coeficientes obtenidos numéricamente con la ecuación (3.28) para el sistema acoplado a un reservorio a temperatura 0 en estos estados, para diferentes valores de β y κ .

En general, se observa que el sistema satisface la ley de Fourier y que los coeficientes de Fourier se ajustan a $\alpha = \frac{1}{\beta}$, igual que en el caso cuántico, excepto por tres zonas:

Cuando la fuerza de amortiguamiento es grande y las patadas pequeñas, la fuerza de amortiguamiento domina sobre el sistema y hace que este pierda toda su energía, como se muestra en la figura 4.8; para $\beta = 0.1$ todos los puntos aparecen, ya que la fuerza de amortiguamiento no es muy grande. En cambio, para $\beta = 0.2$ ya falta el valor de κ más pequeño, mientras que al aumentar el amortiguamiento hasta $\beta = 0.4$ ya comienzan a faltar más valores, correspondientes a aproximadamente $\kappa < 1.5$.

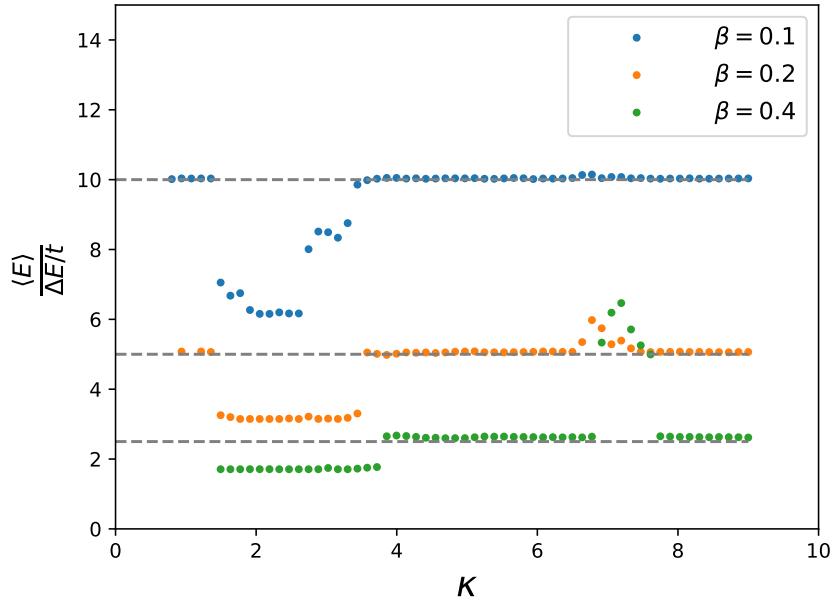


Figura 4.7: Coeficientes de Fourier para diferentes valores de κ y del coeficiente β de acoplamiento entre el sistema y el reservorio a temperatura cero. Las líneas horizontales corresponden a las aproximaciones analíticas dadas por $\alpha = 1/\beta$.

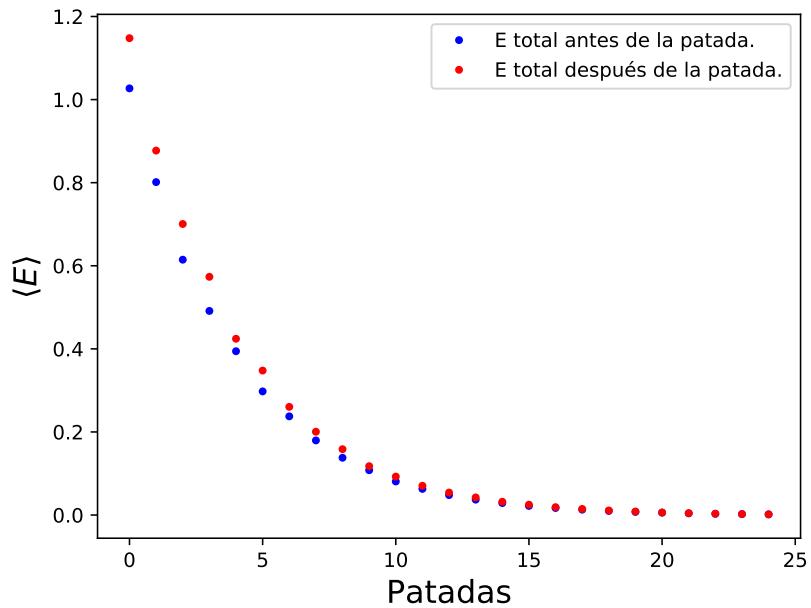


Figura 4.8: Evolución de la energía del sistema para $\beta = 0.2$ y $\kappa = 0.7$, con el reservorio a temperatura cero

En las otras dos zonas donde los coeficientes no se ajustan a $1/\beta$, para aproximadamente $1.5 < \kappa < 3.5$ o $6.5 < \kappa < 7.6$, siendo ligeramente diferentes para cada valor de β , el sistema

presenta puntos de atractores en los cuales convergen todas las trayectorias después de un cierto número de patadas, alrededor de 60 en el primer caso (figura 4.9) y 1800 para el segundo caso (figura 4.10). En estos casos, durante las primeras patadas el sistema aumenta su energía hasta llegar a un valor máximo, y a partir de ahí comienza a disminuir (figura 4.11) mientras las trayectorias convergen hacia los atractores, además de que se presentan solo para los valores más grandes de la fuerza de amortiguamiento.

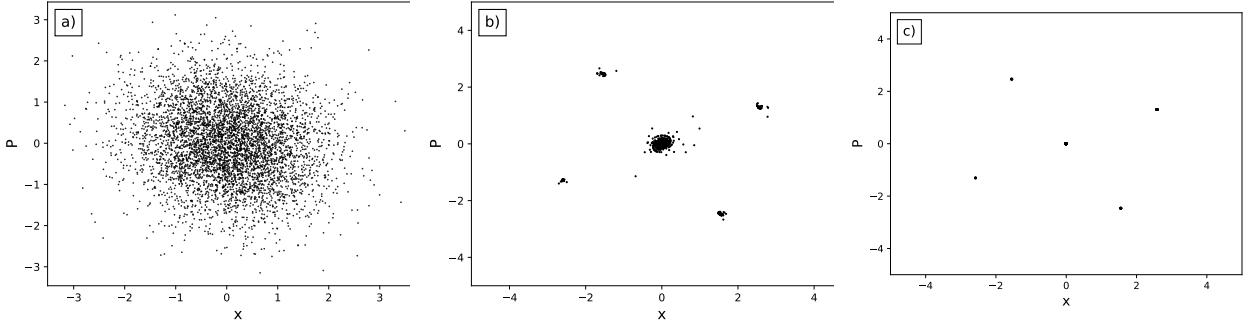


Figura 4.9: Espacio de fase del sistema a) inicial, b) después de 35 patadas y c) después de 100 patadas para $\beta = 0.2$, $\kappa = 7.25$, con el reservorio a temperatura 0

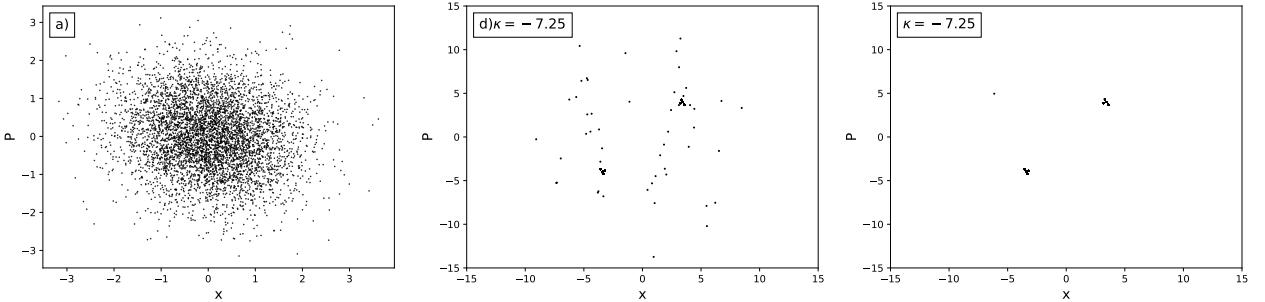


Figura 4.10: Espacio de fase del sistema a) inicial, b) después de 1000 patadas y c) después de 1500 patadas para $\beta = 0.2$, $\kappa = 0.7$, con el reservorio a temperatura 0

La figura 4.12 muestra los coeficientes de Fourier obtenidas para valores diferentes de β y κ , con la temperatura del reservorio en $k_B T_e = 0.1$ y $k_B T_e = 5$.

Al utilizar una temperatura para el reservorio suficientemente grande, estas zonas desaparecen y el sistema satisface la ley de Fourier para todos los valores de β y κ (figura 4.12). Debido a la temperatura del entorno, actúa una fuerza aleatoria sobre las partículas que no depende de su estado, lo que evita que el sistema pierda toda su energía o converja a los atractores. Como se puede ver en la figura 4.12a, los atractores alrededor de $\kappa = 7.25$ desaparecen con

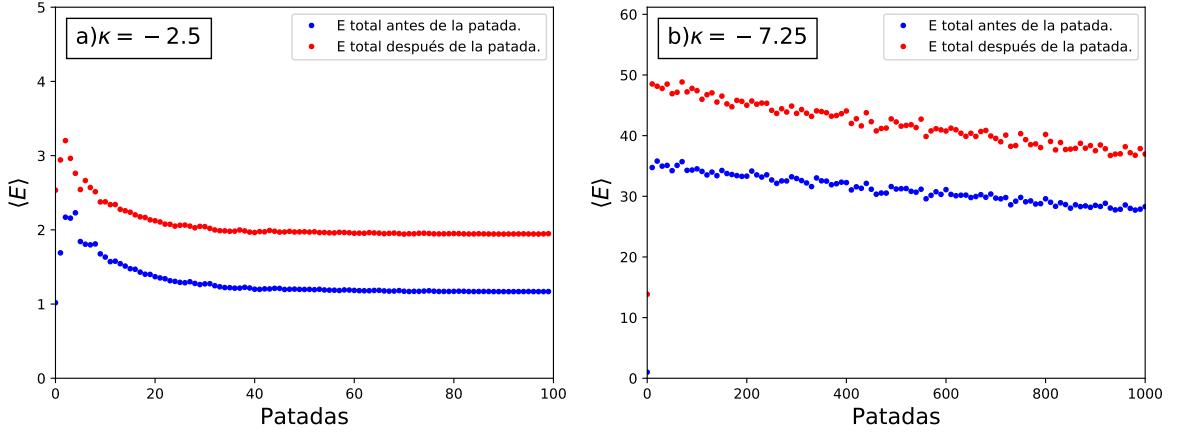


Figura 4.11: Evolución de la energía para los valores de a) $\kappa = 2.5$ y b) $\kappa = 7.25$, con $\beta = 0.2$ y el reservorio a temperatura 0.

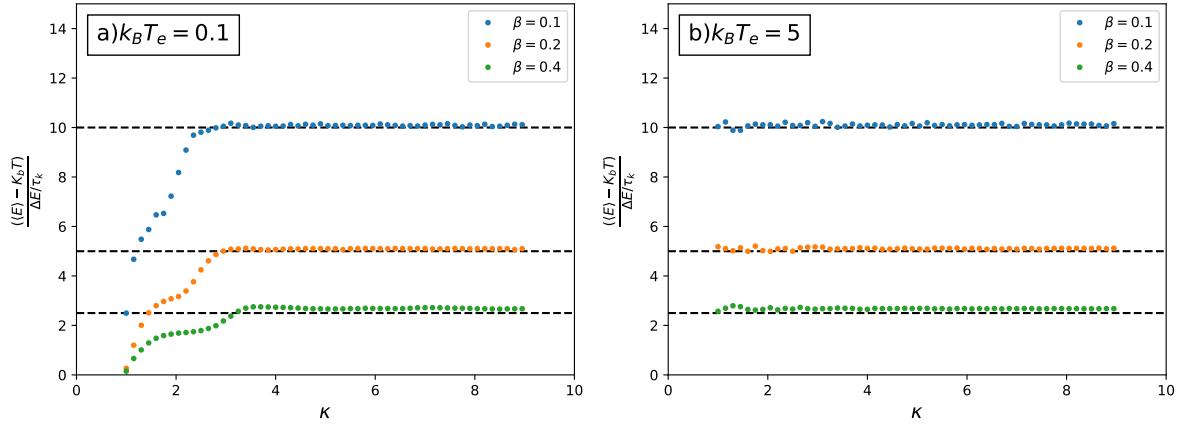


Figura 4.12: Coeficientes de la ley de Fourier para diferentes valores de β y κ , agregando una temperatura definida para el reservorio, $k_B T_e$. Las líneas horizontales corresponden a las predicciones analíticas dadas por $\alpha = 1/\beta$.

temperaturas muy pequeñas, mientras que los de la otra zona comienzan a desaparecer primero para los valores mayores de κ y luego hacia los menores a medida que se va incrementando esta temperatura.

4.4. Comparación con la distribución de Boltzmann

La figura 4.13 muestra el histograma normalizado de la función de distribución, y el porcentaje del error absoluto con respecto a la distribución de Boltzmann en cada celda (inferior), antes y después de la patada 40, una vez que el sistema se encuentra en el cuasi-equilibrio,

considerando el sistema con 75000 partículas.

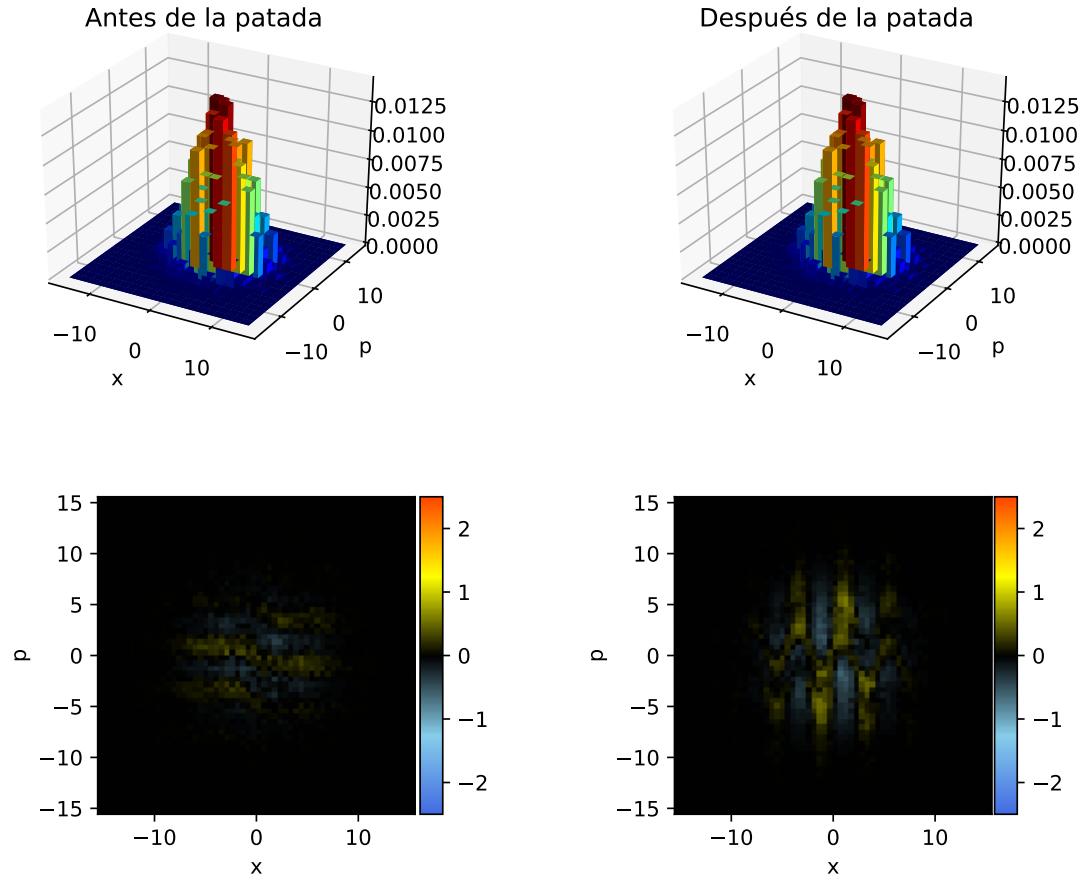


Figura 4.13: Histograma de la función de distribución del sistema durante la patada 40 (superior), y el porcentaje de diferencia con la distribución de Boltzmann en cada celda (inferior), para $\kappa = 2.0$, $\beta = 0.1$ y el reservorio con $k_B T_e = 5$.

En ambos casos, antes y después de la patada, vemos que la diferencia entre las distribuciones no sobrepasa el 1 % en los valores máximos, cuando el sistema se encuentra en el cuasi-equilibrio con el reservorio, siendo mayores justo después de las patadas.

La tabla 4.1 muestra el porcentaje del error absoluto entre la función de distribución del sistema y la distribución de Boltzmann para distintos valores de κ y el valor de $k_B T_e$ del reservorio dado por la ecuación (3.32), para el momento justo antes después y justo después de la patada 40, respectivamente, cuando el sistema se encuentra en el cuasi-equilibrio. Para los mismos casos, se muestra la divergencia de Kullback-Leibler en la tabla 4.2, para antes y después de la patada 40.

$\kappa \backslash k_B T_e$	5 (%)	10 (%)	15 (%)	20 (%)	25 (%)
-2.0	8.2	17.2	4.95	13.6	4.15
-4.0	9.2	19.4	5.65	16.7	4.45
-6.0	8.9	18.6	5.3	18.7	5.15
-8.0	8.8	17.7	6.2	17.3	5.45

Tabla 4.1: Porcentaje del error absoluto de la función de distribución del oscilador armónico pateado con respecto a la distribución de Boltzmann del oscilador armónico, antes y después de la patada 40.

$\kappa \backslash k_B T_e$	5		10		15		20		25	
-2.0	0.038	0.116	0.023	0.079	0.019	0.064	0.021	0.055	0.017	0.043
-4.0	0.043	0.141	0.023	0.114	0.0200	0.101	0.0193	0.089	0.019	0.082
-6.0	0.042	0.137	0.023	0.120	0.0240	0.120	0.024	0.109	0.023	0.103
-8.0	0.036	0.112	0.025	0.109	0.022	0.098	0.023	0.100	0.022	0.092

Tabla 4.2: Divergencia de Kullback-Leibler del oscilador armónico pateado con respecto al oscilador armónico antes y después de la patada 40.

Bibliografía

- [1] Berman, G. P., Rubaev, V. Y., & Zaslavsky, G. M. (1991). “The problem of quantum chaos in a kicked harmonic oscillator. *Nonlinearity*, 4(2), 543.
- [2] Tuwankotta, J. M., & Ihsan, A. F. (2019). “On the dynamics of a kicked harmonic oscillator” *International Journal of Dynamics and Control*, 7(3), 857-865
- [3] Kells, G. A., Twamley, J., & Heffernan, D. M. (2008) “Stability analysis of the kicked harmonic oscillator’s accelerator modes. *Chaos, Solitons & Fractals*, 36(3), 772-780
- [4] Lemos, G. B., Gomes, R., Walborn, S., Ribeiro, S. y Fabricio T., “Experimental observation of quantum chaos in a beam of light” *Nature Communications*, Vol. 3, No. 1, p. 01-07, 2012.
- [5] Reynoso, M. P., Vázquez, P. L., & Gorin, T. (2017). “Quantum kicked harmonic oscillator in contact with a heat bath”. *Physical Review A*, 95(2), 022118.
- [6] Carvalho, A. R. R., de Matos Filho, R. L., & Davidovich, L. (2004). “Environmental effects in the quantum-classical transition for the delta-kicked harmonic oscillator”. *Physical Review E*, 70(2), 026211.
- [7] Arrais, E. G., Sales, J. S., & de Almeida, N. G. (2016). “Entanglement dynamics for a conditionally kicked harmonic oscillator”. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 49(16), 165501.
- [8] Sekimoto, K. (1998). “Langevin equation and thermodynamics”. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 130, 17-27
- [9] Prado Reynoso, M. A. (2016), “Dinámica en el espacio de fase del oscilador armónico pateado acoplado a un reservorio térmico” Tesis de maestría, Universidad de Guadalajara, 2016.
- [10] Ortín Rull, J. y Sancho Herrero J. M.(2006), “Curso de física estadística”, .

- [11] Helrich, S. C. (2011), “Modern Thermodynamics with Statistical Mechanics”, Springer.
- [12] Gilchrist, A. (2017), “*Energy in a Damped Harmonic Oscillator*”,
<http://www.entropy.energy/scholar/node/damped-harmonic-oscillator-energy>, visitado el 24-09-2019.
- [13] Prado Reynoso, M. Á., López Vázquez, P. C., y Gorin, T., “Quantum kicked harmonic oscillator in contact with a heat bath” *Physical Review A*, Vol. 95, No. 2, p. 01-09, 2017.