

Distribuciones de trabajo clásico y cuántico en sistemas unidimensionales.

Karina S. Rodríguez Vigil
Miguel A. Bastarrachea Magnani
José I. Jiménez Aquino

Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa

22 de enero de 2023



- 1 Introducción
- 2 Distribuciones de probabilidad
- 3 Correspondencia Clásico-Cuántica
- 4 Conclusiones y perspectivas
- 5 Referencias

Resumen

En el siguiente trabajo estudiamos la distribución de trabajo desde el punto de vista clásico y cuántico para dos sistemas simples con un sólo grado de libertad: el oscilador armónico convencional y el cuártico sujetos a un parámetro de control. El objetivo es sentar las bases que permitan el estudio de sistemas interactuantes o de mayor dimensionalidad.

Trabajo clásico

La diferencia de energía libre $\Delta F = F_B - F_A$ entre dos estados A y B está conectado al trabajo W realizado en el sistema a través de la desigualdad:

$$W \geq \Delta F \quad (1)$$

La igualdad sólo se da en el caso de un proceso cuasiestático. Para tratar los procesos disipativos Jarzynski derivó de una relación de trabajo de no equilibrio, la llamada igualdad de Jarzynski (*JE, Jarzynski Equality*).

Igualdad de Jarzynski

La JE sigue siendo válida sin importar que tan rápido ocurra el proceso.

$$e^{-\langle \frac{W}{k_B T} \rangle} = e^{-\left(\frac{\Delta F}{k_B T}\right)} \quad (2)$$

Además de determinar la diferencia de energía libre entre los estados de equilibrio inicial y final, no solo a partir de un procesos reversibles, sino también a través de un proceso irreversible que los conecte.



Figura: Christopher Jarzynski

Igualdad de Jarzynski

Los teoremas de fluctuación se han empleado en diversos tipos de sistemas clásicos pequeños como biomoléculas, motores moleculares y partículas coloidales. Además no sólo resultan relevantes en el terreno de la termodinámica clásica. El desarrollo experimental en la manipulación de sistemas cuánticos interactuantes ha motivado la revisión de los fundamentos y las aplicaciones de la termodinámica cuántica. En este contexto se ha mostrado que las relaciones de fluctuación son aplicables a sistemas cuánticos fuera de equilibrio

Trabajo cuántico

Las igualdad de Jarzynski es aplicables a sistemas cuánticos impulsados externamente lejos del equilibrio. Al pasar a sistemas cuánticos surgen varios problemas dados por la misma naturaleza de tales sistemas.

- El trabajo no es un observable.
- Problema de la medición.

Algunos trabajos que abordan el problema del trabajo cuántico.

- P. Talkner, P. Hänggi. (2016). Aspects of quantum work. Phys.Rev.Lett, 93, 1-11.
- M.G. Diaz, G. Guarnieri, M. Paternostro . (2020). Quantum Work Statistics with Initial Coherence. MDPI, 22, 1-16.
- Gemmer J., Michel M., Mahler G., Quantum Thermodynamics, Lecture Notes in Physics Vol. 784, Springer (2009).

Trabajo cuántico

El trabajo a menudo se define en términos de mediciones proyectivas de las energías inicial y final de tal forma que los resultados de la medición serán valores propios.

$$W = E_n^B - E_m^A \quad (3)$$

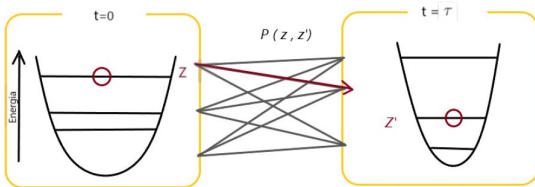


Figura: Esquema de medición proyectiva

La definición de trabajo cuántico conduce a distribuciones estadísticas que satisfacen las relaciones de fluctuación.

Sistemas: Caso Clásico

Protocolo de Jarzynski

- **¿Qué queremos hacer?** Calcular la distribución de trabajo clásica y cuántica.
- **¿Cómo lo hacemos?** Elección de energías (cuánticas).

Los sistemas considerados son el oscilador armónico y cuártico impulsados lejos del equilibrio por medio de un parámetro de control λ_t

$$H_{\lambda_t}^A(z, \lambda_t) = \frac{p^2}{2M} + \lambda_t q^2 \quad (4)$$

$$H_{\lambda_t}^C(z, \lambda_t) = \frac{p^2}{2M} + \lambda_t q^4 \quad (5)$$

con $\lambda_t = \lambda_0 + vt$, el parámetro inicial $\lambda_0 = 1$, la velocidad $v = 5$, punto del espacio fase $z = \{q, p\}$.

Quench Clásico

Por medio de una evolución no adiabática ambos sistemas pasan de una energía inicial en $t = 0$ dada por el hamiltoniano inicial hasta una energía final del hamiltoniano final en $t = \tau$.

- Hamiltonianos iniciales, (subíndice A)

$$H_{\lambda_0}^A(z, \lambda_0) = H_A^A \quad H_{\lambda_0}^C(z, \lambda_0) = H_A^C. \quad (6)$$

- Hamiltonianos Finales (subíndice B)

$$H_{\lambda_0}^A(z, \lambda_0) = H_B^A \quad H_{\lambda_0}^C(z, \lambda_0) = H_B^C. \quad (7)$$

Evolución

$$H_A \implies H_{\lambda_t}(z, \lambda_t) \implies H_B \quad (8)$$

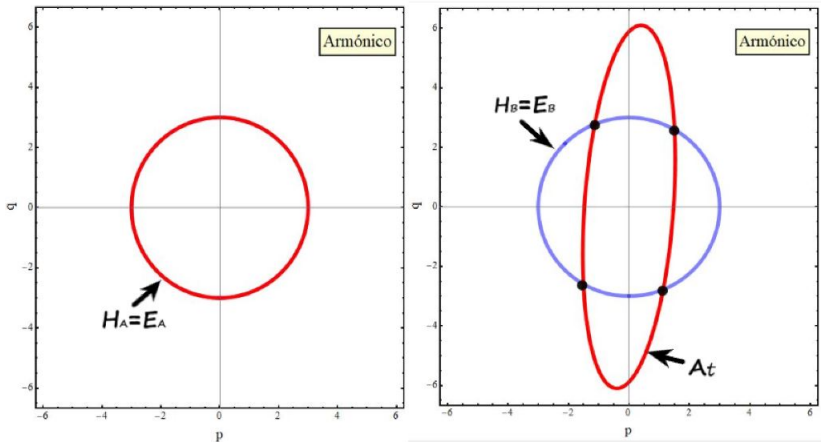


Figura: Evolución de las condiciones iniciales para el oscilador armónico. El círculo rojo representa las condiciones iniciales tomadas de la capa de energía inicial $H_A = E_A$ y la curva A_t esas condiciones evolucionadas en el tiempo. La curva en violeta es la capa de energía final.

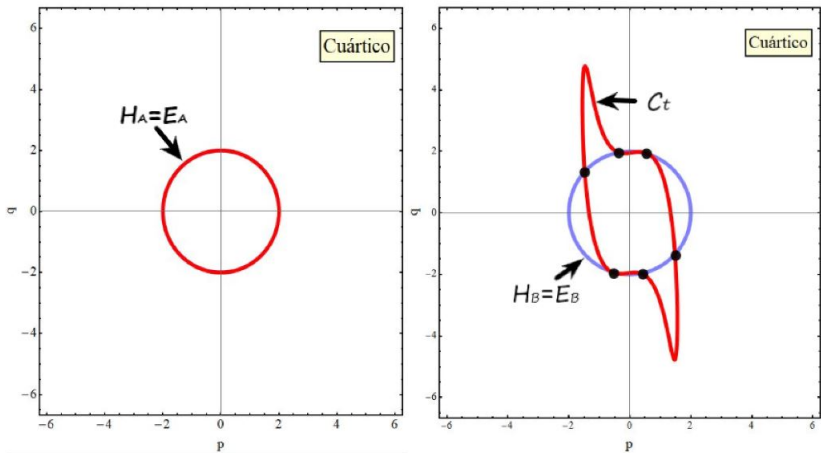


Figura: Evolución de las condiciones iniciales para el oscilador cuártico. El círculo rojo representa las condiciones iniciales tomadas de la capa de energía inicial $H_A = E_A$ y la curva C_t esas condiciones evolucionadas en el tiempo. La curva en violeta es la capa de energía final.

Distribución de trabajo clásico

La evolución de los sistemas esta determinada con las ecuaciones de Hamilton

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (9)$$

El cálculo de las distribuciones de trabajo para ambos sistemas fuera de equilibrio se obtiene a partir de la siguiente relación.

$$P^C(W) \approx \sum_{m,n} P^C(n|m) P^A(m) \delta(W - (E_n^B - E_m^A)) \quad (10)$$

Donde está relación es aplicable a ambos sistemas y el índice C indica que estamos en el caso clásico.

Probabilidades clásicas

Probabilidad inicial

$$P_A^C(m) \approx \frac{e^{-\beta E_m^A}}{Z_A^C} \quad (11)$$

para Z_A^C la función de partición microcanónica. La probabilidad de transición clásica se define como

$$P^C(n|m) \approx \frac{P^C(E_n^B | E_m^A)}{g_B(E_n^B)}. \quad (12)$$

Sistemas: Caso Cuántico

Los sistemas considerados en la parte clásica con los mismos excepto que ahora se habla de operadores.

$$\hat{H}_{\lambda_t}^A(z, \lambda_t) = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \lambda_t \hat{q}^2, \quad \hat{H}_{\lambda_t}^C(z, \lambda_t) = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \lambda_t \hat{q}^4 \quad (13)$$

Para diagonalizar los hamiltonianos es conveniente reescribirlos en la base de Fock.

$$q|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle \right)$$

$$p|n\rangle = -i\sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{n}|n-1\rangle - \sqrt{n+1}|n+1\rangle \right)$$

Ecuación de Eigenvalores

$$H_A|n\rangle = E_A|n\rangle \quad (14)$$

Quench cuántico

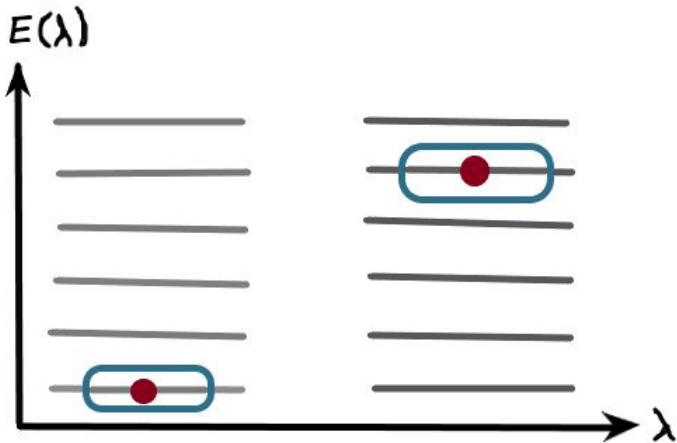


Figura: Evolución de la energía por medio del parámetro λ , dado un proceso no adiabático.

Distribución de trabajo cuántico

La distribución de trabajo cuántico es

$$P^Q(W) = \sum_{m,n} P^Q(n|m) P^A(m) \delta(W - (E_n^B - E_m^A)) \quad (15)$$

donde la estructura de la distribución clásica se mantiene para el caso clásico. La distribución de trabajo inicial es

$$P_A^C(m) = \frac{e^{-\beta E_m^A}}{Z_A^Q} \quad (16)$$

y la probabilidad condicional se define como:

$$P^Q(n|m) = |\langle \phi_n^B | \hat{U}_\tau | \phi_m^A \rangle|^2 = |\langle \phi_n^B | \psi_\tau \rangle|^2 = |c_n(\tau)|^2 \quad (17)$$

Evolución

De la ecuación anterior tenemos que \hat{U} es el operador de evolución temporal, y ϕ_m^A , ϕ_n^B son los estados propios de los hamiltonianos inicial y final respectivamente. Los coeficientes de expansión para cada sistema se pueden obtener de resolver las siguientes ecuaciones diferenciales

$$\dot{c}_n^A = -\lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_n | q^2 | \phi_k \rangle}{E_k^A - E_n^A} e^{i(\gamma_n^A - \gamma_k^A)} c_k^A$$

$$\dot{c}_n^C = -\lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_n | q^4 | \phi_k \rangle}{E_k^C - E_n^C} e^{i(\gamma_n^C - \gamma_k^C)} c_k^C$$

donde $\gamma_n(t)$ determina el promedio de la evolución paramétrica del nivel energético para cada uno de los sistemas.

$$\gamma_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\lambda_{t'}) dt' \quad (18)$$

Evolución paramétrica de los niveles energéticos

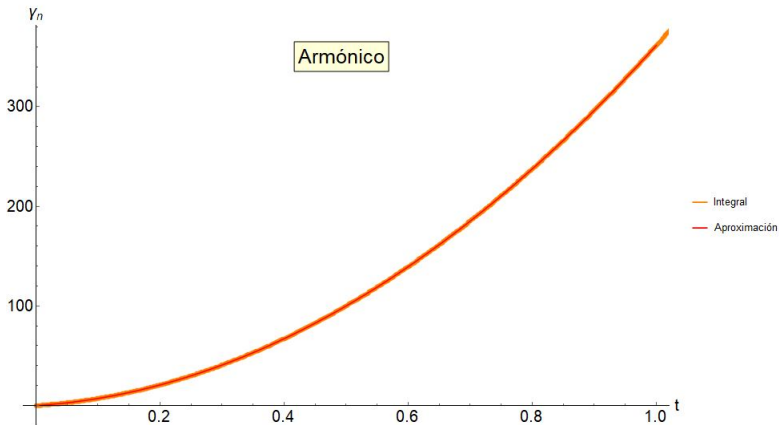


Figura: Valores de $\gamma_n(t)$ para el oscilador armónico en el primer nivel energético $n = 1$, comparados con una aproximación a la integral (17).

Evolución paramétrica de los niveles energéticos

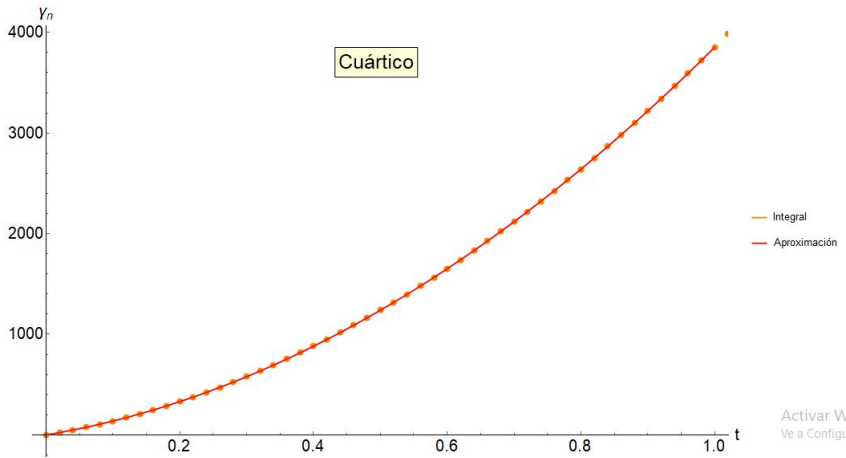


Figura: Valores de $\gamma_n(t)$ para el oscilador cuártico en el primer nivel energético $n = 1$, comparados con una aproximación a la integral (17).

Correspondencia clásico-cuántica

Clásico	Cuántico
$W = H_B(z_\tau) - H_A(z_0)$ $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$ $P^C(W) \approx \sum_{m,n} P^C(n m) P_A^C(m) \delta(W - (E_n^B + E_m^A))$ $P^C(n m) \approx \frac{P^C(E_n^B E_m^A)}{g_B(E_n^B)}$ $P_A^C(m) \approx \frac{e^{-\beta E_m^A}}{Z_A^C}$	$W = E_n^B - E_m^A$ $\hat{H}\psi = E\psi$ $P^Q(W) = \sum_{m,n} P^Q(n m) P_A^Q(m) \delta(W - (E_n^B + E_m^A))$ $P^Q(n m) = \langle \phi_n^B \hat{U}_\tau \phi_k^A \rangle ^2$ $P_A^Q(m) = \frac{e^{-\beta E_m^A}}{Z_A^Q}$

Figura: Resumen.

Correspondencia clásico-cuántica

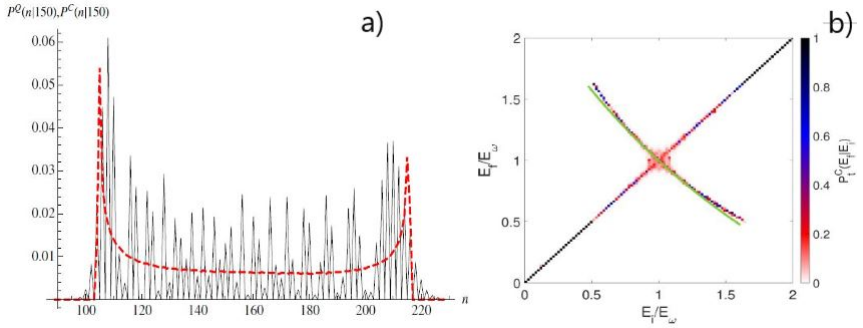


Figura: a) Probabilidades de transición cuántica y clásica para el oscilador cuártico forzado obtenida [1]. b) La probabilidad de transición clásica $P(E_f|E_i)$ en función de la energía inicial y final obtenida por [2].

- 1.- C. Jarzynski, et al., Phys. Rev. X, 5, 031038 (2015).
- 2.- M. Heerwagen et al., Phys. Rev. E, 102, 022121 (2020).

Conclusiones y perspectivas

Una vez obtenidas las distribuciones de trabajo para ambos sistemas, el siguiente paso es analizar que sucede con las distribuciones de trabajo al utilizar metodos semiclassicos.

El andamiaje numérico desarrollado para estos sistemas unidimensionales servirá como base para trabajar con otro tipo de sistemas como por ejemplo sistemas interactuantes, como por ejemplo el Hamiltoniano de Tavis-Cummings

$$\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger + \omega_0 \hat{J}_z + \frac{\gamma}{\sqrt{N}} \left(\hat{J}_+ \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{J}_+ \right) \quad (19)$$

y así observar como las interacciones modifican (o no) las distribuciones de trabajo.

Referencias

- C. Jarzynski, et al., Phys. Rev. X, 5, 031038 (2015).
- M. Heerwagen et al., Phys. Rev. E, 102, 022121 (2020).
- J. Mur-Petit¹, et al., SciPost Phys. Proc. 3, 024 (2020).
- P. Talkner, et al., Phys. Rev. E, 93, 022131 (2016).

Referencias

¡Gracias!

swami.vigil@gmail.com