

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE  
BAJA CALIFORNIA  
FACULTAD DE CIENCIAS



EFICIENCIA DE UNA MÁQUINA TÉRMICA  
CUÁNTICA DE CARNOT EN UN CONFINAMIENTO  
TOROIDAL

TESIS

Que para obtener el título profesional de Físico

PRESENTA:

Oswaldo Rosales Pérez

ASESORA:

Dra. Priscilla E. Iglesias Vázquez

Ensenada, Baja California

Noviembre, 2019

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE  
BAJA CALIFORNIA  
FACULTAD DE CIENCIAS



EFICIENCIA DE UNA MÁQUINA TÉRMICA  
CUÁNTICA DE CARNOT EN UN CONFINAMIENTO  
TOROIDAL

**Oswaldo Rosales Pérez**

Proyecto de tesis como requisito parcial  
para obtener el título profesional de  
**Físico**

Asesora:

**Dra. Priscilla E. Iglesias Vázquez**  
Facultad de Ciencias  
Universidad Autónoma de Baja California

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA  
FACULTAD DE CIENCIAS

EFICIENCIA DE UNA MÁQUINA TÉRMICA CUÁNTICA DE  
CARNOT EN UN CONFINAMIENTO TOROIDAL

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

OSVALDO ROSALES PÉREZ

APROBADO POR:



DRA. PRISCILLA E. IGLESIAS VÁZQUEZ  
DIRECTOR DE TESIS



DR. RUBÉN C. VILLARREAL SÁNCHEZ  
CODIRECTOR DE TESIS



DR. MANUEL IVÁN OCEGUEDA MIRAMONTES  
SINODAL



DR. RAMÓN CARRILLO BASTOS  
SINODAL

*Esta tesis está dedicada a mis padres y hermanos,  
por haber sido mi apoyo a lo largo de todos  
mis estudios y a lo largo de mi vida.*

*También está dedicada a mis amigos, compañeros y profesores  
que me acompañaron y guiaron por esta etapa, aportando a mi  
formación profesional y como ser humano.*

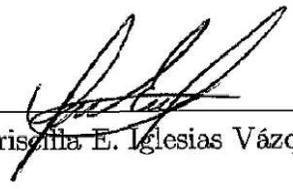
*Gracias a todos por tanto.*

**Resumen** de la tesis presentada por **Oswaldo Rosales Pérez** como requisito parcial para obtener el **Título profesional de Físico**. Ensenada, Baja California, México. Noviembre, 2019

## **EFICIENCIA DE UNA MÁQUINA TÉRMICA CUÁNTICA DE CARNOT EN UN CONFINAMIENTO TOROIDAL**

En esta tesis, se analizan sistemas de una partícula confinada en pozos de potencial infinito bidimensional y con geometría toroidal como máquinas térmicas cuánticas (MTC), siguiendo un ciclo de Carnot cuántico. Se extienden resultados ya reportados en máquinas térmicas cuánticas de Carnot unidimensionales para tomar en cuenta sistemas con los confinamientos propuestos y con múltiples niveles de energía. Se obtienen las ecuaciones de eficiencia y trabajo generado correspondientes y, también, se analiza un caso particular de la MTC de Carnot unidimensional, con el que se llega a que existen combinaciones de expansiones isotérmicas y expansiones totales de los pozos de potencial que pueden generar un mismo trabajo de manera más eficiente.

Resumen aprobado por:



---

Dra. Priscilla E. Iglesias Vázquez

Palabras clave: **Máquinas térmicas cuánticas.**

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>I</b>
<b>Índice de figuras</b>	<b>IV</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Antecedentes</b>	<b>4</b>
2.1. Interés y desarrollo de nanotecnología . . . . .	5
2.2. Máquinas moleculares . . . . .	6
2.3. Máquinas térmicas convencionales y su eficiencia en el presente . . . . .	8
2.3.1. Ciclo clásico de Carnot y teorema de Carnot . . . . .	9
2.3.2. Eficiencia de máquinas térmicas reales . . . . .	11
2.4. Máquinas térmicas cuánticas (MTC) . . . . .	12
<b>3. Metodología</b>	<b>14</b>
3.1. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y el pozo de potencial infinito . . . . .	14
3.2. Procesos termodinámicos cuánticos . . . . .	17
3.3. Máquina térmica cuántica de Carnot de dos estados . . . . .	22
3.4. Generalización de la máquina térmica cuántica de Carnot con $n$ estados	24
3.4.1. Caso sin máxima expansión isotérmica . . . . .	26
3.5. Confinamiento con periodicidad espacial . . . . .	29
3.5.1. Pozo de potencial cuadrado con periodicidad espacial en una sola dirección . . . . .	32
<b>4. Resultados y discusión</b>	<b>34</b>
4.1. MTC en un pozo de potencial infinito bidimensional . . . . .	34
4.1.1. Procesos termodinámicos cuánticos en una MTC bidimensional	36
4.1.2. MTC de Carnot bidimensional de dos estados. . . . .	39
4.1.3. Generalización de la MTC de Carnot bidimensional de $n$ estados	41
4.2. MTC en un confinamiento toroidal . . . . .	45

4.2.1. Generalización de una MTC de Carnot en un confinamiento toroidal de $n$ estados . . . . .	49
4.3. Expansión óptima para una MTC de Carnot unidimensional con múltiples estados . . . . .	51
<b>5. Conclusiones</b>	<b>55</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>57</b>

# Índice de figuras

2.1. <i>Nanocar</i> de cuatro ruedas propuesto por Bernard Feringa (Kudernac et al., 2011). . . . .	7
2.2. Corte transversal axial de la máquina de Carnot. En este diagrama, abcd es un recipiente cilíndrico, cd es un pistón móvil, y A y B son cuerpos de temperatura constante. El recipiente puede colocarse en contacto con cualquiera de los dos cuerpos o retirarse de ambos (Carnot, 1824). . . . .	9
2.3. Ciclo de Carnot para un gas ideal, donde $T_L$ y $T_H$ corresponden a las diferentes temperaturas de las dos fuentes de calor y $Q_H$ y $Q_L$ a la energía calorífica entrando y saliendo del sistema (Zemansky and Dittman, 1997). . . . .	10
3.1. Representación de un pozo de potencial infinito unidimensional de longitud $L$ en la dirección $x$ . . . . .	15
3.2. Representación de las a) Funciones de onda para una partícula confinada en un pozo de potencial infinito unidimensional con $n = 1, 2, 3, 4$ y 5. Cada una de las líneas punteadas horizontales representa $\psi = 0$ para la función de onda respectiva. b) Diagrama de niveles de energía para una partícula en una caja. Cada energía es $n^2 E_1$ donde $E_1$ es la energía del nivel fundamental (Sears et al., 2005). . . . .	16
3.3. Representación de la expansión de un pozo de potencial unidimensional desde el ancho $L_A$ hasta el ancho $L_B$ y el cambio en las tres primeras eigenfunciones y sus eigenenergías correspondientes. . . . .	18
3.4. Ciclo de Carnot cuántico para una MTC unidimensional con 3 estados de energía disponibles ( $n = 3$ ). Azul para el caso de máxima expansión isotérmica desde $L_A$ hasta $L_B = kL_A$ , cuando $k = 3$ , y naranja para el caso de expansión isotérmica hasta $L_B = k'L_A$ , cuando $k' = 2$ . En la esquina superior derecha se puede ver como cuando el sistema está a una longitud inicial $L_A$ , la partícula ocupa el estado base, pero una vez que comienza la expansión, se tiene una superposición de los 3 estados disponibles. . . . .	27

3.5.	Intervalo $0 \leq x \leq 2\pi R$ que se repite a lo largo de una línea infinita (Zwiebach, 2004).	30
3.6.	Una región cuadrada del plano bidimensional puede identificar a la superficie de un cilindro usando la propiedad de periodicidad en dos de sus extremos opuestos, como en la esquina superior derecha. Introduciendo periodicidad en los dos extremos restantes se puede identificar la superficie de un toro (Zwiebach, 2004).	31
4.1.	Mapa de contornos para la eficiencia de de una MTC con 2 niveles de energía disponibles en función de la longitud inicial $L_{x_A}$ y la longitud total de expansión $L_{x_C}$ .	43
4.2.	Mapa de contornos para la eficiencia de de una MTC con 4 niveles de energía disponibles en función de la longitud inicial $L_{x_A}$ y la longitud total de expansión $L_{x_C}$ .	43
4.3.	Mapa de contornos para la eficiencia de de una MTC con 6 niveles de energía disponibles en función de la longitud inicial $L_{x_A}$ y la longitud total de expansión $L_{x_C}$ .	44
4.4.	Mapa de contornos para la eficiencia de de una MTC con 8 niveles de energía disponibles en función de la longitud inicial $L_{x_A}$ y la longitud total de expansión $L_{x_C}$ .	44
4.5.	Pozo bidimensional con radios de periodicidad $r$ en la dirección $x$ y $R$ en la dirección $y$ (Zwiebach, 2004).	45

# Capítulo 1

## Introducción

Las máquinas térmicas, las cuales aprovechan fuentes de energía en forma de calor y a través de procesos termodinámicos producen trabajo, han estado en la mente del ser humano desde la antigüedad, posiblemente desde el descubrimiento del fuego. Fue hasta el siglo XVII que éstas comenzaron a ser tomadas en cuenta como dispositivos útiles y posibles de construir, cuando el conocimiento y comprensión de los complicados procesos involucrados inició su desarrollo. Siglos después, una vez establecida el área de la termodinámica y con el surgimiento de la mecánica cuántica, se puede ver que hay lugar dentro de las máquinas térmicas para implementar mejoras profundas, implementando principios físicos que solo la mecánica cuántica ofrece.

El problema principal que presentan las máquinas térmicas es su eficiencia, la cual es generalmente pequeña o muy baja. Desde que se inició su desarrollo en el siglo XVII, empezando con la máquina de vapor, ha sido el interés de todos encontrar la manera de obtener más trabajo con la misma cantidad de energía necesaria para su funcionamiento. Muchos avances se lograron hacer en cuanto a su diseño y operación,

y poco a poco, conforme el entendimiento puramente físico de los procesos térmicos que ocurrían fue mejorando, la idea de la máquina térmica ideal, la más eficiente, se veía más clara. Fue Sadi Carnot, un ingeniero francés a quien se le conoce como el padre fundador de la termodinámica, quien mediante un desarrollo analítico propuso y demostró cómo sería la máquina térmica ideal, la cual sigue un ciclo de dos procesos isotérmicos y dos adiabáticos en un sistema en expansión y compresión expuesto a dos fuentes de calor (Carnot, 1824).

Ahora, con la meta de combatir el principal problema de las máquinas térmicas, en las últimas décadas se ha comenzado a explorar la posibilidad de implementar principios de mecánica cuántica en una máquina para así lograr incrementar su eficiencia. Los primeros en proponer esta idea fueron Scovil and Schulz-DuBois (1959) quienes en 1959 presentan la idea para, mediante la implementación de dispositivos Másers, encontrar un análogo a un ciclo de Carnot que no estuviera en un sistema clásico como un gas atrapado dentro de un pistón, sino en un sistema cuántico con apenas una sola partícula a la cual se le podría extraer trabajo. Donde la principal diferencia sería que, en este nuevo sistema, la energía permitida para esta partícula estaría cuantizada. Tomando esto en cuenta, ellos esperaban que las diferencias entre la física clásica y la cuántica abrieran la puerta a máquinas aún más eficientes que las que se tienen hoy en día o incluso más eficientes que la máquina ideal propuesta por Carnot.

Desde entonces, el área de máquinas térmicas cuánticas se ha seguido desarrollando, proponiendo nuevos sistemas cuánticos con los cuales sería posible idear máquinas, al igual que el estudio de diferentes sustancias con las cuales éstas máquinas podrían operar, desde partículas con espín hasta sistemas cuánticos más complejos donde se presente coherencia cuántica o sistemas que aprovechen la superposición cuánti-

ca.

El objetivo principal de esta tesis es proponer y analizar la eficiencia de una máquina térmica cuántica de Carnot en un sistema con acceso a múltiples niveles de energía y con un confinamiento toroidal. Esto, siguiendo un desarrollo en el cual la Máquina Térmica Cuántica (MTC) se construye analíticamente desde un punto de vista bidimensional para implementar después un concepto de periodicidad espacial y obtener finalmente la geometría de toro para el confinamiento que queremos. Se espera que las ecuaciones desarrolladas, tanto de eficiencia como fuerza, trabajo y las restricciones cuánticas que aparecen para cada sistema, sirvan para agilizar y poder profundizar el estudio de sistemas similares y también analizar los efectos que tienen la geometría de confinamiento, la superposición de estados y el tipo de expansión en otros sistemas.

# Capítulo 2

## Antecedentes

En la literatura, la primera mención de utilizar el ciclo de Carnot con una máquina cuántica se da por [Scovil and Schulz-DuBois \(1959\)](#) donde se introduce la idea de usar un amplificador de microondas por la emisión estimulada de radiación (Máser) de tres niveles como una máquina térmica. En este artículo se discuten las diferencias conceptuales que aparecen al tratar con comportamientos cuánticos y clásicos dentro de las máquinas. La principal diferencia viene del hecho de que un Máser maneja niveles discretos de energía asociados a la energía interna de una partícula, a diferencia de la máquina térmica convencional que maneja un espectro continuo de energías asociadas al movimiento externo de las sustancias con las que se trabaja. Es importante mencionar que la discretización de los niveles de energía, al abordar una máquina térmica desde un aspecto cuántico, resulta una ventaja pues trae consigo una simplicidad conceptual en el desarrollo de las ecuaciones al no trabajar con un continuo energético como en sistemas macroscópicos.

## 2.1. Interés y desarrollo de nanotecnología

Richard Feynman consideró un número interesante de ramificaciones que salen de la habilidad de manipular materia a un nivel atómico. Él estuvo particularmente interesado en las posibilidades que se podrían abrir con éstos avances, tales como circuitería cada vez más densa para una capacidad computacional increíble, microscopios aun más poderosos que aquellos del microscopio electrónico de barrido. Estas ideas se vieron realizadas con el microscopio de efecto túnel ([Binnig et al., 1982](#)), el microscopio de fuerza atómica ([Binnig et al., 1986](#)) y otros ejemplos en la microscopía por sondas de barrido, y en sistemas de almacenamiento tales como el Milipede, desarrollado por investigadores de IBM ([Vettiger et al., 2000](#)).

Feynman también sugirió que debería ser posible hacer máquinas en la escala nanométrica, las cuales pudieran manipular átomos individualmente e incluso llevar a cabo síntesis química. Introduce un gran número de ideas sobre los efectos que vendrían con la miniaturización de las máquinas y las oportunidades que aparecerían. Sería posible desarrollar circuitos electrónicos con solo 7 átomos y otros sistemas que involucraran y aprovecharan el hecho de que a la escala de unos cuantos átomos las leyes que dominarían éstos sistemas serían las de la mecánica cuántica. Esto implicaría aprovechar la cuantización de los niveles de energía, tal como el trabajo de [Scovil and Schulz-DuBois \(1959\)](#) lo hace por primera vez con máquinas térmicas, y también las interacciones con espines cuantizados como se ve en trabajos recientes sobre máquinas térmicas cuánticas ([Chen et al., 2002](#)).

El rol de Feynman en el desarrollo del área de la nanotecnología es considerado como limitado pues, midiendo su impacto a través de citas en la literatura, su lectura

de "There's plenty of room at the bottom" ([Feynman, 2012](#)), aunque cautivadora y visionaria, pasó desapercibida durante décadas hasta que el término *nanotecnología* empezó a ganar atracción en la década de los 90. A pesar de esto, comparando las ideas que llegó a presentar en aquel entonces, con los avances logrados en los últimos años queda claro que la visión que tenía para el mundo a nanoescala iba en la dirección correcta.

## 2.2. Máquinas moleculares

Uno de los avances más importantes en los últimos años en el área de máquinas a nanoescala vino con el diseño y síntesis de las máquinas moleculares, desarrolladas por Jean-Pierre Sauvage, Sir J. Fraser Stoddart y Bernard L. Feringa, quienes recibieron el Premio Nobel en Química en el 2016 por su trabajo en la producción de moléculas con movimientos controlables que, al añadirles energía, son capaces de realizar trabajos que pueden llevar al área de la química a una nueva dimensión de control. El primer paso lo dio Jean-Pierre Sauvage en 1983 ([Dietrich-Buchecker et al., 1983](#)) al lograr unir dos moléculas con formas de anillo para formar cadenas, llamadas catenanos, que en lugar de estar unidos por enlaces covalentes en los que comparten sus electrones, se unen a través de enlaces con más libertad, llamados enlaces mecánicos, con los cuales era posible el movimiento relativo entre las diferentes partes de la cadena. El segundo paso lo dio Sir Fraser Stoddart en 1991 ([Anelli et al., 1991](#)) con el desarrollo de un rotaxano el cual consiste de una estructura molecular mecánicamente entrelazada donde una molécula en forma de anillo es atrapada alrededor de un eje molecular. Finalmente, en 1999, Bernard Feringa fue la primera persona en sintetizar un motor molecular cuando consiguió hacer rotar continuamente y en la

misma dirección una aspa molecular (Koumura et al., 1999) para después demostrar el movimiento de una estructura en forma de chasis compuesta por cuatro de éstos motores que propulsan al llamado *Nanocar* sobre una superficie (Kudernac et al., 2011), como se muestra en la figura 2.1.

El estado de las máquinas moleculares se encuentra en la misma etapa en la que se encontraba el motor eléctrico en 1830 cuando científicos mostraban sus avances en manivelas y ruedas giratorias sin saber que se llegarían a tener todas las aplicaciones de hoy en día. Las máquinas moleculares probablemente serán usadas en el desarrollo de nuevos materiales, sensores y sistemas de almacenamiento de energía.

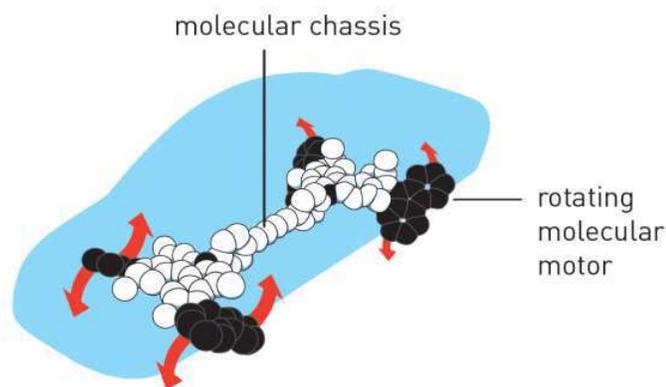


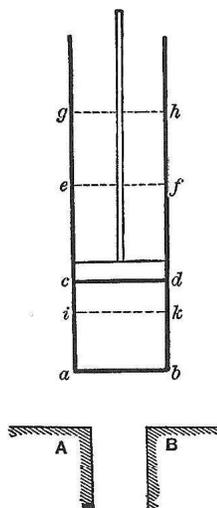
Illustration: ©Johan Jarnestad/The Royal Swedish Academy of Sciences

**Figura 2.1:** *Nanocar* de cuatro ruedas propuesto por Bernard Feringa (Kudernac et al., 2011).

## 2.3. Máquinas térmicas convencionales y su eficiencia en el presente

Las máquinas térmicas, las cuales consisten en sistemas que convierten energía térmica y química en trabajo mecánico, han sido conocidas desde la antigüedad pero solo se convirtieron en dispositivos útiles hasta la revolución industrial en la segunda mitad del siglo XVIII. Fue durante el siglo XVII donde aparecen los primeros prototipos de turbinas de vapor diseñadas por Giovanni Branda ([Branca, 1990](#)) y los primeros diseños de máquinas de vapor a base de pistones por Cristian Huygens y Denis Papin ([Thurston, 1887](#)). Para el siglo XVIII aparecen las primeras máquinas de vapor comercializadas por Thomas Newcomen entre otros. Ya en el siglo XIX, en 1824, Sadi Carnot introduce el ciclo de Carnot y la hipotética máquina de Carnot, la cual es la base teórica para todos los modelos de máquinas térmicas ([Zemansky and Dittman, 1997](#)).

La hipotética máquina de Carnot, como se muestra en la figura [2.2](#), presenta el modelo ideal para aprovechar calor de dos fuentes a distintas temperaturas y realizar la mayor cantidad de trabajo. Esto con un proceso cíclico de expansiones y compresiones isotérmicas y adiabáticas. Carnot, con su modelo de máquina, logró demostrar el principio que especifica el límite en eficiencia que una máquina térmica puede alcanzar, dependiendo solamente de las temperaturas de las fuentes de calor ([Zemansky and Dittman, 1997](#)).



**Figura 2.2:** Corte transversal axial de la máquina de Carnot. En este diagrama,  $abcd$  es un recipiente cilíndrico,  $cd$  es un pistón móvil, y  $A$  y  $B$  son cuerpos de temperatura constante. El recipiente puede colocarse en contacto con cualquiera de los dos cuerpos o retirarse de ambos (Carnot, 1824).

### 2.3.1. Ciclo clásico de Carnot y teorema de Carnot

El ciclo de Carnot es un ciclo termodinámico de cuatro pasos, como se muestra en la figura 2.3, cada uno de éstos es reversible. Se lleva a cabo dentro de un cilindro que contiene gas ideal y un pistón, además de dos fuentes de calor a diferentes temperaturas  $T_H$  y  $T_L$ , donde  $T_H > T_L$ .

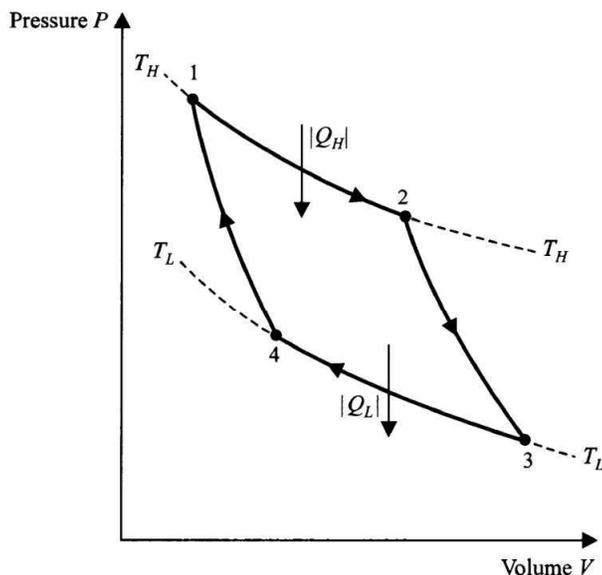
1. **Expansión isotérmica:** El gas se expone a la fuente de calor a temperatura  $T_H$  mientras se expande, conservando así la misma temperatura.
2. **Expansión adiabática:** El sistema se aísla de las fuentes de calor y la expansión continúa bajando hasta la temperatura  $T_L$ .
3. **Compresión isotérmica:** El gas se comprime manteniendo contacto con la fuente de calor a temperatura  $T_L$ , conservando así la misma temperatura.

4. **Compresión adiabática:** El sistema se aísla de las fuentes de calor y la compresión continúa hasta llegar a la temperatura inicial  $T_H$ .

El teorema de Carnot es una declaración formal de que ninguna máquina térmica que opere con dos fuentes de calor puede ser más eficiente que una máquina de Carnot operando entre las mismas temperaturas, tal como se tiene en la siguiente expresión

$$\eta_{max} = \eta_{Carnot} = \frac{W}{Q_H} = 1 - \frac{T_L}{T_H}, \quad (2.1)$$

donde  $W$  es el trabajo mecánico realizado por el sistema,  $Q_H$  es la energía calorífica entrando en el sistema, mientras que  $T_L$  y  $T_H$  corresponden a las temperaturas absolutas de las dos fuentes de calor a las que se expone el sistema, donde  $T_L < T_H$ .



**Figura 2.3:** Ciclo de Carnot para un gas ideal, donde  $T_L$  y  $T_H$  corresponden a las diferentes temperaturas de las dos fuentes de calor y  $Q_H$  y  $Q_L$  a la energía calorífica entrando y saliendo del sistema (Zemansky and Dittman, 1997).

### 2.3.2. Eficiencia de máquinas térmicas reales

Es importante tomar en cuenta que el ciclo y la máquina de Carnot son conceptos idealizados que consideran procesos termodinámicos reversibles. En la práctica resulta imposible llevar a cabo este tipo de procesos. Esto lleva a que las máquinas térmicas que son usadas en la realidad presentan eficiencias muy lejanas de aquellas que se esperan de una máquina de Carnot trabajando con las mismas fuentes de calor. Algunos ejemplos de estas máquinas se presentan en la tabla 2.1, donde se puede ver la diferencia entre las eficiencias alcanzadas por las máquinas reales y aquella que podría alcanzar una máquina de Carnot. Otro ejemplo de la eficiencia de una máquina térmica se tiene con los motores modernos de gasolina que tienen una eficiencia térmica máxima entre 25 % y 50 % cuando se usan para impulsar un automóvil. Lo que significa que del 50 % al 75 % de la energía es emitida en forma de calor al ambiente sin haber realizado ningún tipo de trabajo útil (Baglione, 2007). Las diferencias entre las eficiencias ideales y las reales de las máquinas térmicas muestra la necesidad del desarrollo de nuevas tecnologías que permitan acercarse cada vez más a la eficiencia ideal de una máquina de Carnot.

Central eléctrica	$T_L(^{\circ}C)$	$T_H(^{\circ}C)$	$\eta(Carnot)$	$\eta(observada)$
Central eléctrica de carbón en West Thurrock (Reino Unido)	25	565	0.64	0.36
CANDU (Canadá)	25	300	0.48	0.30
Central geotérmica de Larderello (Italia)	80	250	0.33	0.16

**Tabla 2.1:** Desempeño observado de máquinas térmicas reales (Curzon and Ahlborn, 1975).

## 2.4. Máquinas térmicas cuánticas (MTC)

El problema principal de las máquinas térmicas convencionales es el de su eficiencia, la cual es generalmente baja. Uno de los esfuerzos de las últimas décadas para incrementar la eficiencia ha sido el de la aplicación de la mecánica cuántica en las máquinas al llevarlas a tamaños cada vez más pequeños. El estudio de las máquinas térmicas cuánticas comenzó, como se mostró al principio de éste capítulo, alrededor de los años 60 cuando se presentó la idea de aprovechar las propiedades cuánticas, como la discretización de los niveles de energía, en modelos de Másers para hacer analogías con máquinas térmicas clásicas (Scovil and Schulz-DuBois, 1959). Hoy en día el área de la física para máquinas térmicas cuánticas se ha vuelto más profunda con estudios sobre procesos termodinámicos en un nivel cuántico, así como generalizaciones para fuerza y presión en el desarrollo de ciclos.

Bender et al. (2000) propusieron una MTC de Carnot de dos niveles basada en una sola partícula cuántica como sustancia de trabajo confinada en un pozo de potencial infinito unidimensional, haciendo la analogía a un gas ideal atrapado en el interior de un cilindro. Esta MTC siguió un ciclo de procesos isotérmicos y adiabáticos cuánticos, que son análogos a sus correspondientes procesos clásicos, y trabajando con transiciones entre dos niveles de energía llegó a las expresiones de eficiencia para la MTC análoga a la de una máquina de Carnot clásica.

Chen et al. (2002) siguieron el desarrollo de Bender et al. e introdujeron ciclos de MTC con sistemas no interactuantes de espín  $1/2$  como sustancia de trabajo que siguen procesos isotérmicos e isomagnéticos a diferencia del ciclo clásico de Carnot. Después, Quan et al. (2007) reportaron resultados para el modelo unidimensional de

Bender et al. en un sistema con geometría de oscilador armónico y un sistema bidimensional cuadrado, obteniendo las ecuaciones de eficiencia para éstos y proponiendo también el estudio del ciclo de Otto.

En la continuación a su trabajo, [Quan \(2009\)](#) generalizan sus resultados para MTCs trabajando con ciclos de Carnot, Otto, Brayton y Diesel. También encuentran la expresión general para la fuerza ejercida sobre las paredes de los pozos cuando se tienen sistemas de partículas distribuidas en multiniveles como sustancia de trabajo y obtienen las ecuaciones de eficiencia para sistemas bidimensionales y tridimensionales de partículas confinadas en pozos de potencial infinito y osciladores armónicos.

[Latifah and Purwanto \(2011\)](#) evalúan en su artículo *Multi-State Quantum Carnot Engine*, el caso de una MTC basada en un sistema de múltiples estados disponibles para una partícula confinada en un pozo de potencial. Esto para generalizar los resultados obtenidos anteriormente por [Bender et al. \(2000\)](#) para una MTC de solo dos estados y así obtener las ecuaciones de eficiencia para sistemas de hasta  $n$  estados. Además, propone una modificación al ciclo de Carnot cuántico donde la expansión isotérmica bien puede no terminar hasta el estado de energía más alta disponible, pero en un estado intermedio conservando la misma expansión total del caso simple. De esta manera muestra que es posible mejorar la eficiencia de una MTC de múltiples estados reduciendo la expansión isotérmica en el ciclo.

# Capítulo 3

## Metodología

### 3.1. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y el pozo de potencial infinito

Tomamos en cuenta una partícula de masa  $m$  confinada en un potencial  $V(r)$  dependiente solamente de la posición de la partícula. Es posible encontrar los estados estacionarios de la partícula en este potencial, al igual que la energía  $E$  asociada a cada uno de éstos estados (Eisberg et al., 1994). Esto se logra implementando y resolviendo la ecuación de Schrödinger que, en este caso independiente del tiempo, se representa de la siguiente manera

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r), \quad (3.1)$$

donde  $\hbar = 1,055 \times 10^{34} Js$  es la constante de Planck,  $\psi(r)$  es la función de onda que describe el comportamiento de la partícula y  $E$  corresponde a las energías asociadas

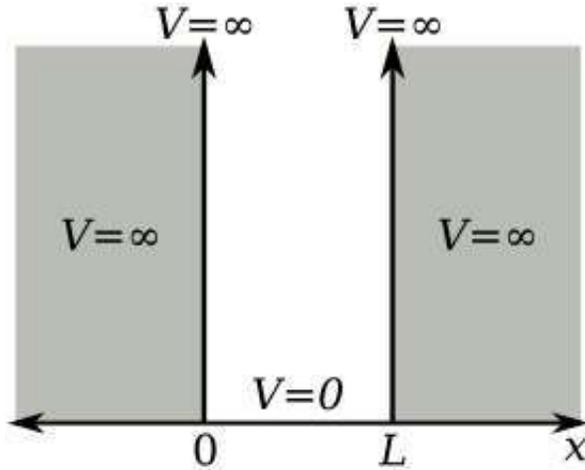
a cada nivel de energía de la partícula en el pozo.

Introduciendo un pozo de potencial infinito unidimensional como el de la figura 3.1 la ecuación 3.1 se reduce a la siguiente ecuación diferencial de segundo orden de una sola variable,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (3.2)$$

y con las condiciones de frontera adecuadas para anular la función de onda en las paredes del pozo

$$\psi(x=0) = \psi(x=L) = 0. \quad (3.3)$$



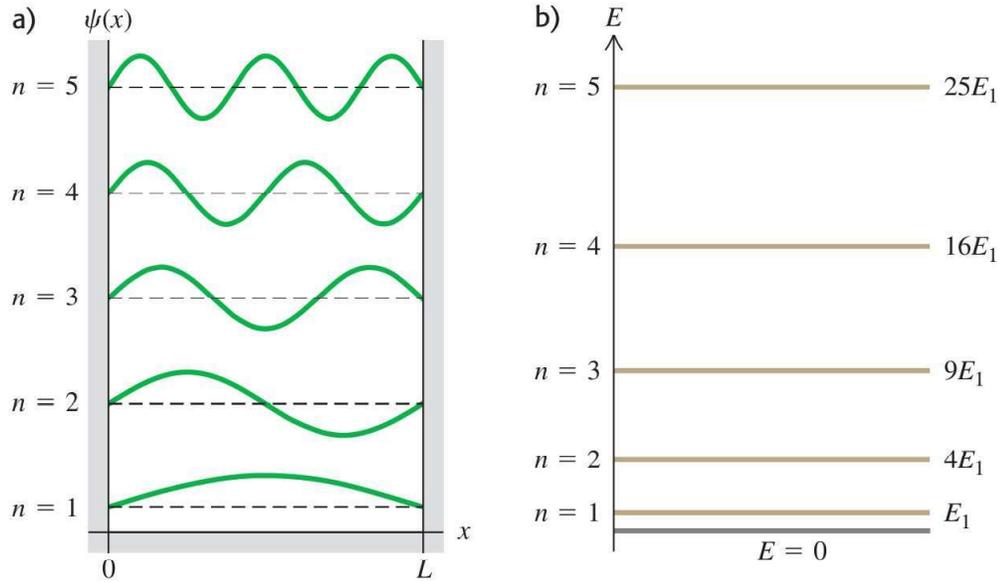
**Figura 3.1:** Representación de un pozo de potencial infinito unidimensional de longitud  $L$  en la dirección  $x$ .

Al resolver la ecuación 3.2 dentro del pozo de potencial, se obtienen las eigenfunciones normalizadas y eigenenergías del sistema, las cuales son

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.4)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.5)$$

y se pueden ver gráficas en la figura 3.2



**Figura 3.2:** Representación de las a) Funciones de onda para una partícula confinada en un pozo de potencial infinito unidimensional con  $n = 1, 2, 3, 4$  y  $5$ . Cada una de las líneas punteadas horizontales representa  $\psi = 0$  para la función de onda respectiva. b) Diagrama de niveles de energía para una partícula en una caja. Cada energía es  $n^2 E_1$  donde  $E_1$  es la energía del nivel fundamental (Sears et al., 2005).

Entonces, la solución para la ecuación de onda resulta ser una combinación lineal de todas las eigenfunciones, esto es,

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad (3.6)$$

donde los coeficientes  $a_n$  satisfacen la condición de normalización

$$\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1, \quad (3.7)$$

y cada término  $a_n$  representa la amplitud de probabilidad del estado  $\psi_n$  contenida en la función de onda completa  $\Psi$ , en otras palabras  $|a_n|^2$  corresponde a la probabilidad

de que la partícula se encuentre en el estado  $\psi_n$  (De La Peña, 2014).

En base a estos coeficientes y las eigenenergías de cada estado se obtiene el valor de expectación del Hamiltoniano, dado por

$$E = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n = \sum_{n=1}^{\infty} [n^2 |a_n|^2] \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (3.8)$$

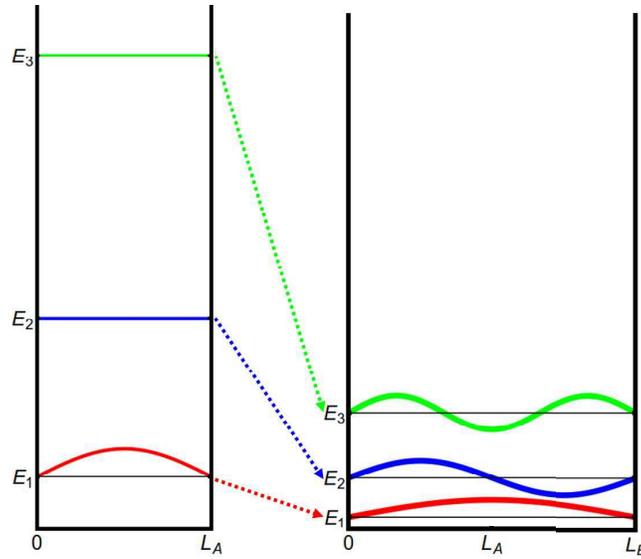
### 3.2. Procesos termodinámicos cuánticos

De acuerdo con Bender et al. (2000), es posible encontrar un análogo cuántico para los procesos isotérmicos y adiabáticos de un ciclo de Carnot clásico. Esto para llegar a un ciclo cuántico definido por la expansión y compresión de un pozo de potencial donde una partícula es excitada y desexcitada entre el estado base de energía y el primer estado excitado. Un ejemplo de este proceso con tres niveles de energía, se muestra en la figura 3.3.

Como se mencionó previamente en la sección 2.3.1, clásicamente, es posible calcular la eficiencia  $\eta$  de una máquina térmica tomando en cuenta el cociente entre la cantidad de trabajo mecánico producido  $W$  y la cantidad de calor  $Q_H$  tomado por el sistema (Zemansky and Dittman, 1997), de modo que

$$\eta = \frac{W}{Q_H}. \quad (3.9)$$

Basados en el principio de conservación de energía y tomando en cuenta un sistema en el que no haya variaciones en la energía interna, podemos expresar la cantidad de



**Figura 3.3:** Representación de la expansión de un pozo de potencial unidimensional desde el ancho  $L_A$  hasta el ancho  $L_B$  y el cambio en las tres primeras eigenfunciones y sus eigenenergías correspondientes.

trabajo generado en un ciclo como

$$Q_H - Q_L = W, \quad (3.10)$$

donde  $Q_L$  corresponde a la energía absorbida por el sistema. Combinando las ecuaciones 3.9 y 3.10 se obtiene la siguiente

$$\eta = \frac{Q_H - Q_L}{Q_H} = 1 - \frac{Q_L}{Q_H}. \quad (3.11)$$

En esta relación se puede notar que la eficiencia perfecta se obtendría cuando no hay pérdidas de calor en el sistema, es decir,  $Q_L = 0$ . Para obtener trabajo mecánico de la máquina, es necesario contar con dos fuentes de calor a distintas temperaturas  $T_H$

y  $T_L$ , donde  $T_H > T_L$ . Carnot demostró que la eficiencia de tal máquina es

$$\eta = 1 - \frac{T_C}{T_H}. \quad (3.12)$$

Ahora, para calcular la eficiencia de una máquina térmica cuántica, suponemos que una de las paredes del pozo infinito, digamos la pared en  $x = L$  en la figura 3.1, puede moverse, en analogía con el movimiento de un pistón en un cilindro para un sistema termodinámico clásico. Si se le permite a esta pared moverse una cantidad infinitesimal  $dL$ , entonces la función de onda  $\psi(x)$ , los eigenestados  $\phi_n(x)$ , y los niveles de energía  $E_n$  todos cambian como función de  $L$ . Como consecuencia, el valor de expectación del Hamiltoniano  $E(L)$  también cambia infinitesimalmente. Es natural definir la fuerza sobre la pared del pozo de potencial como la derivada negativa de la energía (Bender et al., 2000). Entonces, la fuerza  $F$  ejercida sobre la pared del pozo y el trabajo  $W_{i-f}$  realizado en el proceso desde una longitud  $L_i$  hasta  $L_f$ , están dados por

$$F = -\frac{dE(L)}{dx}, \quad (3.13)$$

$$W_{i-f} = \int_{L_i}^{L_f} F dL, \quad (3.14)$$

respectivamente.

Basándonos en esta fuerza, ahora podemos definir los diferentes procesos cuánticos análogos a aquellos de los procesos clásicos. Es claro, de las ecuaciones 3.8 y 3.13, que la expresión de la fuerza es

$$F(L) = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_n(L)|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^3}, \quad (3.15)$$

donde  $a_n(L)$  es el  $n$ -ésimo coeficiente para un pozo de longitud  $L$ .

En un proceso adiabático clásico el sistema se aísla térmicamente, lo que quiere decir que para un gas en un cilindro el calor no puede fluir hacia dentro o hacia fuera del gas. En este proceso el pistón se mueve pero el sistema se mantiene en equilibrio en todo momento. En una MTC se tiene una partícula en un pozo de potencial donde una de las paredes se mueve. Para el proceso adiabático cuántico, se aísla el sistema de modo que la partícula no se excita de ninguna manera. Como el sistema se mantiene en equilibrio en todo momento, los valores absolutos de los coeficientes  $|a_n|$  deben permanecer constantes, lo que indica que no debería haber ninguna transición entre estados (Bender et al., 2000). De esta manera, la fuerza  $F_{adi}$ , que se aplica sobre la pared del pozo de potencial durante el proceso adiabático, queda como

$$F_{adi}(L) = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_n(L_i)|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^3}, \quad (3.16)$$

donde  $a_n(L_i)$  es el  $n$ -ésimo coeficiente en el estado inicial con ancho  $L_i$  en el pozo. Ahora, combinando las ecuaciones 3.16 y 3.14 obtenemos el trabajo realizado por un proceso adiabático desde una longitud inicial  $L_i$  hasta una longitud final  $L_f$ ,

$$W_{adi} = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_n(L_i)|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{L_i^2} - \frac{1}{L_f^2} \right). \quad (3.17)$$

En un proceso isotérmico clásico, el sistema se pone en contacto con una fuente de calor para que la temperatura del gas dentro del cilindro permanezca constante mientras el pistón se mueve. En el proceso isotérmico cuántico, el sistema se excita de modo que el valor de expectación del Hamiltoniano se mantenga constante. Para lograr esto, los coeficientes de expansión  $a_n$  deben de cambiar de modo que el valor

la ecuación 3.8 sea fijo mientras  $L$  incrementa.

Los coeficientes  $a_n$  cambiarán, indicando que habrá transición entre estados, pero la condición de normalización, dado por la ecuación 3.7, se seguirá satisfaciendo. Esto implica que, durante el proceso isotérmico, es necesario que el valor de expectación del Hamiltoniano se mantenga igual entre las condiciones iniciales, con el pozo a una longitud  $L_i$ , y las condiciones del pozo en transición, con una longitud  $L$  en expansión. Tomamos la ecuación 3.8 para  $L_i$  y  $L$ , y al igualarlas nos queda la restricción de expansión isotérmica para la longitud del pozo,

$$L^2 = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_n(L)|^2}{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_n(L_i)|^2} L_i^2. \quad (3.18)$$

Combinando las ecuaciones 3.18 y 3.13 se obtiene la expresión para la fuerza  $F_{iso}$ , sobre la pared del pozo durante el proceso isotérmico, de modo que

$$F_{iso}(L) = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_n(L_i)|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_i^2 L}, \quad (3.19)$$

y, de acuerdo a esta fuerza, el trabajo en un proceso isotérmico desde un ancho  $L_i$  hasta un ancho  $L_f$  está dado por

$$W_{iso} = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_n(L_i)|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_i^2} \ln \left( \frac{L_f}{L_i} \right). \quad (3.20)$$

### 3.3. Máquina térmica cuántica de Carnot de dos estados

El caso más simple de una partícula confinada en un pozo de potencial es cuando solo existen dos estados disponibles, esto es,  $n = 1$  y  $n = 2$ . De esta manera, la condición de normalización, en la ecuación 3.7, se convierte en  $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$ .

Para el primer proceso de expansión isotérmica, en el que empezamos desde un ancho  $L_A$ , la restricción entre las longitudes, según la ecuación 3.18, es

$$L^2 = (|a_1|^2 + 4|a_2|^2)L_A^2, \quad (3.21)$$

donde la máxima expansión,  $L_B = 2L_A$ , se da cuando la partícula pasa por completo al estado excitado, es decir,  $a_1 = 0$  y  $a_2 = 1$ . Calculando el trabajo, dado por la ecuación 3.20, nos queda que

$$W_{A-B} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_A^2} \ln(2) \quad (3.22)$$

La segunda expansión es adiabática, manteniendo el sistema en un solo estado  $\psi_2$ . A diferencia del proceso isotérmico, no hay un límite definido para el ancho máximo al que se puede llegar, entonces asumimos que el pozo se expande desde  $L_B$  hasta  $L_C = \alpha L_B$  donde  $\alpha$  es real y mayor a uno. Con la ecuación 3.17 calculamos el trabajo

$$W_{B-C} = 4 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_B^2} \left( 1 - \frac{1}{\alpha^2} \right). \quad (3.23)$$

Ahora, tenemos una compresión isotérmica desde un ancho  $L_C$ , donde  $a_1(L_C) = 0$  y  $a_2(L_C) = 1$ , hasta  $L_D$ , donde ocurre una transición de estado de modo que  $a_1(L_D) = 1$  y  $a_2(L_D) = 0$ . De la restricción de longitudes en la ecuación 3.18, nos queda que la máxima compresión se da con  $L_D = L_C/2$ . Entonces, de la ecuación 3.20, el trabajo realizado es

$$W_{C-D} = -4 \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_C^2} \ln(2). \quad (3.24)$$

Por último, tenemos una compresión adiabática desde  $L_D$  hasta  $L_A$ , de modo que el trabajo, dado por la ecuación 3.17, es

$$W_{D-A} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{L_D^2} - \frac{1}{L_A^2} \right), \quad (3.25)$$

Con esto, el trabajo total está dado por

$$W = W_{A-B} + W_{B-C} + W_{C-D} + W_{D-A} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_A^2} \ln(2) \left( 1 - \frac{1}{\alpha^2} \right). \quad (3.26)$$

Para calcular la eficiencia se necesita calcular la energía absorbida por el pozo de potencial durante la expansión isotérmica (Bender et al., 2000). Esta cantidad de energía  $Q_H$  está dada por

$$Q_H = \int_{L_A}^{L_B} F_{Iso}(L) dL = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L_A^2 m} \ln 2. \quad (3.27)$$

La eficiencia, que es a razón entre el trabajo total  $W$  y la energía  $Q_H$  absorbida por el pozo, queda entonces como

$$\eta = 1 - \frac{1}{\alpha^2} = 1 - 4 \left( \frac{L_A}{L_C} \right)^2, \quad (3.28)$$

donde se puede ver que mientras mayor sea la expansión completa del pozo en  $L_C$  en comparación con la longitud inicial  $L_A$ , la máquina será mas eficiente.

### 3.4. Generalización de la máquina térmica cuántica de Carnot con $n$ estados

En el trabajo de [Latifah and Purwanto \(2011\)](#), tenemos un sistema con  $n$  eigenestados disponibles  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ , asociados a las eigenenergías  $E_1, E_2, \dots, E_n$ , respectivamente, y con estado inicial en el estado base  $\psi_1$ , energía  $E_1$  y ancho  $L_A$ . La condición de normalización está dada por

$$|a_1(L)|^2 + |a_2(L)|^2 + \dots + |a_n(L)|^2 = 1, \quad (3.29)$$

usando  $a_1(L_A) = 1, a_2(L_A) = \dots = a_n(L_A) = 0$ , la ecuación 3.18 nos queda como

$$L^2 = (|a_1(L)|^2 + 4|a_2(L)|^2 + \dots + n^2|a_n(L)|^2) L_A^2. \quad (3.30)$$

Esto nos da una máxima expansión en  $L_B = nL_A$  cuando la partícula hace la transición completa el estado excitado  $\phi_n$  con  $a_n(L_B) = 1, a_1(L_B) = \dots = a_{n-1}(L_B) = 0$ . Así, el trabajo realizado hasta la máxima expansión es

$$W_{A-B} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_A^2} \ln(n), \quad (3.31)$$

La segunda expansión es desde  $L_B$  hasta  $L_C = \alpha L_B$  y ocurre solamente en el estado excitado  $\phi_n$ . El trabajo adiabático, según la ecuación 3.17, es

$$W_{B-C} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_A^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right). \quad (3.32)$$

Para la compresión isotérmica desde  $L_C$ , tomamos la restricción de longitudes de la ecuación 3.18 con condición inicial  $a_1 = \dots = a_{n-1} = 0$  y  $a_n = 1$ , entonces

$$L^2 = \frac{|a_1(L)|^2 + 4|a_2(L)|^2 + \dots + n^2|a_n(L)|^2}{n^2} L_C^2, \quad (3.33)$$

nos da la máxima compresión con  $L_D = L_C/n$  cuando el sistema hace la transición completa al estado base  $\phi_1$ . El trabajo queda como

$$W_{C-D} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{m\alpha^2 L_A^2} \ln(n). \quad (3.34)$$

Por último, el trabajo realizado durante la compresión adiabática desde  $L_D$  hasta  $L_A$  queda como

$$W_{D-A} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_A^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right), \quad (3.35)$$

Así, el trabajo total es

$$W = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_A^2} \ln(n) \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right), \quad (3.36)$$

y la eficiencia resulta ser,

$$\eta = 1 - \frac{1}{\alpha^2} = 1 - n^2 \left(\frac{L_A}{L_C}\right)^2. \quad (3.37)$$

De una manera, es la misma que en el caso de dos estados con  $n = 2$ , véase ecuación 3.28. También podemos notar que si mantenemos la misma relación entre  $L_A$  y  $L_C$ , la eficiencia aumenta al reducir el número de estados disponibles.

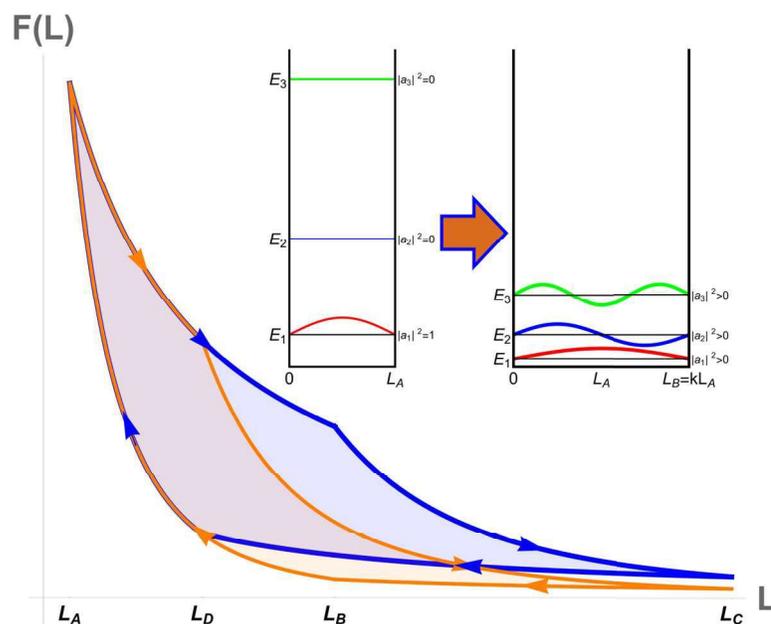
### 3.4.1. Caso sin máxima expansión isotérmica

En el trabajo de [Latifah and Purwanto \(2011\)](#), también se considera el caso de un sistema de  $n$  eigenestados donde la expansión isotérmica desde la longitud inicial  $L_A$  no es máxima, es decir que no llega hasta  $nL_A$ , sino que llega hasta  $L_B = kL_A$  donde  $k < n$  y no necesariamente entero. Este ciclo se ejemplifica, y compara con aquel de expansión máxima ( $k = n$ ), en la figura 3.4.

En la primera expansión isotérmica el trabajo realizado es

$$W_{A-B} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_A^2} \ln(k), \quad (3.38)$$

donde hay que remarcar que, al no llegar a la expansión máxima, el sistema se encuentra en una superposición de sus  $n$  eigenestados. En  $L_B = kL_A$ , los coeficientes  $a_1, \dots, a_n$  aún deben de satisfacer la condición de normalización de la ecuación 3.7 y además, por el proceso isotérmico, la ecuación 3.18 de restricción de longitudes se



**Figura 3.4:** Ciclo de Carnot cuántico para una MTC unidimensional con 3 estados de energía disponibles ( $n = 3$ ). Azul para el caso de máxima expansión isotérmica desde  $L_A$  hasta  $L_B = kL_A$ , cuando  $k = 3$ , y naranja para el caso de expansión isotérmica hasta  $L_B = k'L_A$ , cuando  $k' = 2$ . En la esquina superior derecha se puede ver como cuando el sistema está a una longitud inicial  $L_A$ , la partícula ocupa el estado base, pero una vez que comienza la expansión, se tiene una superposición de los 3 estados disponibles.

convierte en

$$|a_1|^2 + 4|a_2|^2 + \dots + n^2|a_n(L)|^2 = k^2, \quad (3.39)$$

Las ecuaciones 3.7 y 3.39 restringen los coeficientes del sistema mientras se lleva a cabo el siguiente proceso de expansión adiabática desde  $L_B = kL_A$  hasta  $L_C$ .

La expansión adiabática se realizará hasta la expansión total alcanzada en el caso convencional con  $L_C = \alpha nL_A$ . Para calcular el trabajo realizado tomando en cuenta la superposición del sistema, se sustituye la ecuación 3.39 en la ecuación 3.17 para obtener

$$W_{B-C} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_A^2} \left( 1 - \frac{k^2}{n^2} \frac{1}{\alpha^2} \right). \quad (3.40)$$

Para la compresión isotérmica desde  $L_C = \alpha nL_A$ , tomamos la restricción de longitudes de la ecuación 3.18 con la condición dada en la ecuación 3.39, entonces

$$L^2 = \frac{|a_1(L)|^2 + 4|a_2(L)|^2 + \dots + n^2|a_n(L)|^2}{k^2} L_C^2, \quad (3.41)$$

nos da la máxima compresión con  $L_D = L_C/k$  cuando el sistema hace la transición completa desde la superposición de estados hasta el estado base  $\psi_1$ . El trabajo queda como

$$W_{C-D} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_A^2} \left( \frac{k^2}{n^2} \frac{1}{\alpha^2} \right) \ln(k). \quad (3.42)$$

Por último, el trabajo realizado durante la compresión adiabática, cuando el sistema ya está en el estado base, desde  $L_D = \alpha nL_A/k$  hasta  $L_A$  queda como

$$W_{D-A} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_A^2} \left( 1 - \frac{k^2}{n^2 \alpha^2} \right), \quad (3.43)$$

Así, el trabajo total es

$$W = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_A^2} \left( 1 - \frac{k^2}{n^2 \alpha^2} \right) \ln(k), \quad (3.44)$$

y la eficiencia resulta

$$\eta = 1 - \frac{k^2}{n^2 \alpha^2}, \quad (3.45)$$

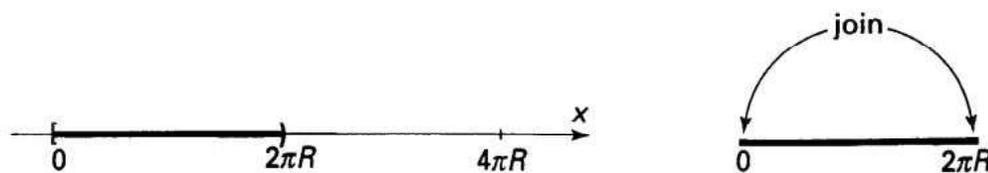
que depende del factor de la expansión isotérmica  $k$  y el factor de expansión total del sistema  $n\alpha$ , de modo que la eficiencia aumenta con una expansión isotérmica menor (menor  $k$ ) y con una expansión total del pozo mayor ( $\alpha$  mayor).

### 3.5. Confinamiento con periodicidad espacial

Es posible que dimensiones extras sean indetectables por experimentos de bajas energías si éstas dimensiones se encuentran compactadas o enrolladas dentro de un volumen muy pequeño ([Zwiebach, 2004](#)).

Considere un mundo unidimensional sobre una línea infinita donde  $x$  representa una coordenada sobre la línea. Para cada punto  $P$  sobre la línea existe una  $x(P)$  única llamada *coordenada  $x$  del punto  $P$* . Podemos definir un buen sistema de coordenadas escogiendo un origen y midiendo la distancia desde el punto  $P$  hasta éste origen. Si imaginamos que sobre esta línea infinita todo se repite a una distancia de  $2\pi R$ , como

en la figura 3.5, no hay manera de distinguir este mundo de un círculo de radio  $R$  y circunferencia  $2\pi R$ .



**Figura 3.5:** Intervalo  $0 \leq x \leq 2\pi R$  que se repite a lo largo de una línea infinita (Zwiebach, 2004).

Un círculo de radio  $R$  puede ser representado, en un plano de dos dimensiones como todos los puntos que se encuentran a una distancia  $R$  del punto llamado centro del círculo, pero en esta nueva representación no hay necesidad de un centro ni de un espacio bidimensional. El radio  $R$  es simplemente la cantidad que multiplicada por  $2\pi$  nos da el segmento de la línea que se repite infinitamente. Podemos expresar la propiedad de periodicidad como

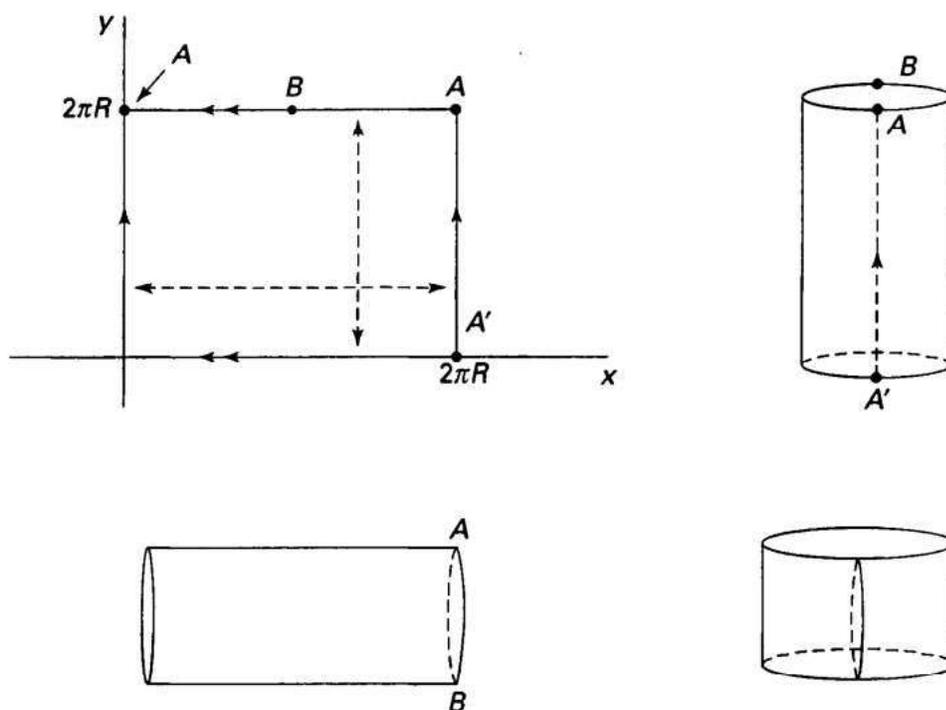
$$x \sim x + 2\pi R. \quad (3.46)$$

Si introducimos periodicidad sobre el plano  $xy$  de igual manera que en el caso unidimensional, pero ahora con

$$(x, y) \sim (x + 2\pi R, y), \quad (3.47)$$

$$(x, y) \sim (x, y + 2\pi R), \quad (3.48)$$

lo que obtenemos es que el área de interés en el plano infinito  $xy$ , ahora se restringe al dominio de la región  $0 \leq x \leq 2\pi R$  y  $0 \leq y \leq 2\pi R$ . El espacio resultante, como se puede ver en la parte inferior derecha de la figura 3.6, es la superficie de un toro.



**Figura 3.6:** Una región cuadrada del plano bidimensional puede identificar a la superficie de un cilindro usando la propiedad de periodicidad en dos de sus extremos opuestos, como en la esquina superior derecha. Introduciendo periodicidad en los dos extremos restantes se puede identificar la superficie de un toro (Zwiebach, 2004).

### 3.5.1. Pozo de potencial cuadrado con periodicidad espacial en una sola dirección

Considere un pozo de potencial infinito cuadrado de longitud  $a$  en el plano  $(x, y)$  donde la dirección  $y$  se encuentra envuelta en un círculo pequeño de radio  $R$ . Para esto, se toma en cuenta la condición de periodicidad espacial en la dirección de  $y$ , de modo que

$$\Psi(x, y) = \Psi(x, y + 2\pi R), \quad (3.49)$$

por lo que

$$|\Psi(x, y)|^2 = |\Psi(x, y + 2\pi R)|^2, \quad (3.50)$$

la probabilidad de encontrar a la partícula es la misma en ambos puntos.

La dirección en  $x$  no tiene ningún cambio. Como la dirección de  $y$  ahora se ha convertido en un círculo de circunferencia  $2\pi R$ , se considera que la partícula confinada en el pozo se mueve sobre la superficie de un cilindro, como en la figura 3.6.

En el caso bidimensional, la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) = E\Psi(x, y). \quad (3.51)$$

Aplicando separación de variables, con  $\Psi(x, y) = \psi(x)\phi(y)$ , la ecuación 3.51 toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi(y)} \frac{\partial^2 \phi(y)}{\partial y^2} = E \quad (3.52)$$

Los términos dependientes de  $x$  y de  $y$  deben ser constantes y se puede obtener la solución para cada dirección por separado. En la dirección  $x$  se tienen las mismas

condiciones que en un pozo unidimensional donde la solución tiene las condiciones de frontera de que debe anularse en los extremos, es decir  $\psi(x=0) = \psi(x=a) = 0$ , por lo tanto la solución a las eigenfunciones en  $x$  es

$$\psi_n(x) = c_n \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad (3.53)$$

donde  $c_k$  es la amplitud y  $n = 1, 2, 3, \dots$  es un número entero. En la dirección  $y$ , ya no es necesario que la solución se anule en los extremos, pues al aplicar periodicidad espacial en la función de onda no existe algo parecido a un extremo, en su lugar, la condición de frontera viene del hecho de que  $y$  al igual que  $y + 2\pi R$  representan el mismo punto, por lo tanto la solución debe cumplir que

$$\phi(y) = \phi(y + 2\pi R). \quad (3.54)$$

Tomando esto en cuenta, la solución para  $\phi(y)$  queda como

$$\phi_s(y) = a_s \sin \frac{s y}{R} + b_s \cos \frac{s y}{R}, \quad (3.55)$$

donde  $a_s$  y  $b_s$  son amplitudes y  $s = 1, 2, 3, \dots$  es un número entero. La solución general queda entonces como

$$\Psi(x, y) = \sum_{n,s=1}^{\infty} c_n \sin \frac{n\pi x}{a} \left[ a_s \sin \frac{s y}{R} + b_s \cos \frac{s y}{R} \right], \quad (3.56)$$

mientras los eigenvalores son

$$E_{n,s} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{n\pi}{a} \right)^2 + \left( \frac{s}{R} \right)^2 \right] \quad (3.57)$$

# Capítulo 4

## Resultados y discusión

Ahora se extienden los resultados ya reportados de máquinas térmicas cuánticas unidimensionales a un entorno bidimensional, con múltiples niveles de energía y además introduciendo periodicidad espacial en las dimensiones. También se hace un análisis sobre las ecuaciones ya reportadas por [Latifah and Purwanto \(2011\)](#) para una MTC unidimensional con múltiples niveles de energía, y se encuentran combinaciones de expansión isotérmica y expansión total del pozo que producen un mismo trabajo pero de manera más eficiente.

### 4.1. MTC en un pozo de potencial infinito bidimensional

Consideremos una partícula de masa  $m$  confinada en un pozo de potencial infinito bidimensional cuadrado de longitud  $L$ . En principio, las longitudes del pozo en ambas direcciones son iguales, pero es necesario hacer la distinción desde ahora como  $L_x$  y  $L_y$

en las direcciones  $x$  y  $y$ , respectivamente. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo del sistema es

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (4.1)$$

donde  $\Psi(x, y)$  debe satisfacer las condiciones de frontera adecuadas para anular la función en las cuatro paredes del pozo

$$\Psi(0 \leq x \leq L_x, 0) = \Psi(0 \leq x \leq L_x, L_y) = 0, \quad (4.2)$$

$$\Psi(0, 0 \leq y \leq L_y) = \Psi(L_x, 0 \leq y \leq L_y) = 0. \quad (4.3)$$

La solución general de la ecuación 4.1 se puede expresar como una combinación lineal de eigenfunciones  $\phi_{n,s}(x, y)$  y de eigenenergías  $E_{n,s}$ :

$$\phi_{n,s}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{L_x L_y}} \sin\left(\frac{n\pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{s\pi}{L_y} y\right), \quad (4.4)$$

$$E_{n,s} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n^2}{L_x^2} + \frac{s^2}{L_y^2} \right), \quad n, s = 1, 2, 3, \dots \quad (4.5)$$

Entonces la solución general a la ecuación 4.1 queda como

$$\Psi(x, y) = \sum_{n,s=1}^{\infty} a_{n,s} \phi_{n,s}(x, y), \quad (4.6)$$

donde los coeficientes  $a_{n,s}$  satisfacen la condición de normalización

$$\sum_{n,s=1}^{\infty} |a_{n,s}|^2 = 1. \quad (4.7)$$

Con base en estos coeficientes y las eigenenergías de cada estado, se obtiene el valor de expectación del Hamiltoniano

$$E = \sum_{n,s=1} |a_{n,s}|^2 E_{n,s} = \sum_{n,s=1} |a_{n,s}|^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n^2}{L_x^2} + \frac{s^2}{L_y^2} \right), \quad n, s = 1, 2, 3, \dots \quad (4.8)$$

#### 4.1.1. Procesos termodinámicos cuánticos en una MTC bidimensional

Siguiendo la metodología descrita en la sección 3.2, a continuación se obtienen las expresiones de fuerza y el trabajo de los procesos isotérmicos y adiabáticos cuánticos involucrados en una MTC bidimensional que realiza el ciclo de Carnot.

En nuestro pozo bidimensional, suponemos que una sola de las cuatro paredes del pozo, digamos la pared ortogonal al eje  $x$ , en  $x = L_x$ , puede moverse como un pistón en un cilindro de dos dimensiones de un sistema termodinámico clásico. Si se le permite a esta pared moverse una cantidad infinitesimal  $dL_x$ , entonces de las ecuaciones 4.4 y 4.6 podemos ver que la función de onda  $\Psi(x, y)$ , los eigenestados  $\phi_{n,s}(x, y)$ , y los niveles de energía  $E_{n,s}$  todos cambian como función de  $L_x$ . Como consecuencia, el valor de expectación del Hamiltoniano  $E(L_x)$  también cambia infinitesimalmente (véase ecuación 4.8). Al igual que el caso unidimensional, es natural definir la fuerza sobre la pared del pozo de potencial como la derivada negativa de la energía (Bender et al., 2000). Entonces, la fuerza  $F$  ejercida sobre la pared del pozo está dada por

$$F = -\frac{dE(L_x)}{dx}. \quad (4.9)$$

Es necesario resaltar que en el análisis que aquí se presenta, se considera una MTC

en la que solo una de las direcciones del pozo se expande y contrae, mientras que la otra se mantiene con longitud constante. También, se toma en cuenta que la solución en la dirección constante, al igual que la eigenenergía correspondiente a esa dirección se mantendrá en el estado base. En este caso en particular, la longitud  $L_x$  cambiará y la longitud  $L_y = L$  se dejará constante, manteniendo a la partícula en el estado base  $s = 1$  (véase ecuación 4.8).

Basándonos en la fuerza descrita por la ecuación 4.9, ahora podemos definir los diferentes procesos termodinámicos cuánticos necesarios para realizar un ciclo cuántico de Carnot. Primero, queda claro de las ecuaciones 4.8 y 4.9 que la fuerza ejercida sobre la pared es

$$F(L_x) = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_{n,1}(L_x)|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_x^3}, \quad (4.10)$$

donde  $a_{n,1}$  corresponde al coeficiente con índices  $s = 1$  y  $n$ , para un pozo de longitud  $L_x$  en el eje  $x$  y  $L_y = L$  en la dirección  $y$ .

Durante el proceso adiabático cuántico, en el cual el sistema debe permanecer en equilibrio, sin transición entre estados y con los coeficientes  $a_{n,1}$  constantes a lo largo del proceso, la expresión de la fuerza queda como

$$F_{adi}(L_x) = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_{n,1}(L_{x_i})|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_x^3}, \quad (4.11)$$

donde  $a_{n,1}(L_{x_i})$  es el coeficiente con índices  $s = 1$  y  $n$  correspondiente al estado inicial del sistema con longitud  $L_{x_i}$  durante el proceso adiabático. Calculando el trabajo en un proceso adiabático desde la longitud inicial  $L_{x_i}$  hasta la longitud final  $L_{x_f}$ , se obtiene que

$$W_{adi} = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_{n,1}(L_{x_i})|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{m} \left( \frac{1}{L_{x_i}^2} - \frac{1}{L_{x_f}^2} \right). \quad (4.12)$$

Para el proceso isotérmico se sigue el mismo procedimiento de la sección 3.2. La transición entre estados implica que los coeficientes  $a_{n,1}$  cambiarán en función de  $L_x$  respetando la condición de normalización de la ecuación 4.7. El valor de expectación del Hamiltoniano debe mantenerse constante durante la transición desde  $L_{x_i}$  hasta alguna longitud  $L_x$ . Tomando la ecuación 4.8 para  $E(L_{x_i})$  en la condición inicial, e igualándola con  $E(L_x)$  durante la transición, se obtiene la restricción de longitud para el proceso isotérmico en el pozo bidimensional,

$$L_x^2 = \frac{\sum_{n,s=1}^{\infty} n^2 |a_{n,s}(L_x)|^2}{\sum_{n,s=1}^{\infty} n^2 |a_{n,s}(L_{x_i})|^2 + \left(\frac{L_{x_i}}{L}\right)^2 \sum_{n,s=1}^{\infty} s^2 [|a_{n,s}(L_{x_i})|^2 - |a_{n,s}(L_x)|^2]} L_{x_i}^2. \quad (4.13)$$

Aplicando la condición de normalización de la ecuación 4.7 y  $s = 1$ , esta expresión se reduce a

$$L_x^2 = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_{n,1}(L_x)|^2}{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_{n,1}(L_{x_i})|^2} L_{x_i}^2. \quad (4.14)$$

Notamos que el hecho de condicionar la dirección  $y$  solo al estado base con  $s = 1$  se obtiene una restricción en la longitud de expansión muy parecida a aquella del caso unidimensional expresada en la ecuación 3.18.

La fuerza  $F_{iso}$  ejercida en la pared durante el proceso isotérmico se obtiene sustituyendo  $L_x^2$  de la ecuación 4.14 en la ecuación 4.10, de modo que

$$F_{iso}(L_x) = \left[ \sum_n^{\infty} n^2 |a_{n,1}(L_{x_i})|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_{x_i}^2 L_x} \quad (4.15)$$

De acuerdo a esta fuerza, el trabajo realizado durante el proceso isotérmico desde una longitud  $L_{x_i}$  hasta  $L_{x_f}$  es

$$W_{iso} = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} n^2 |a_{n,1}(L_{x_i})|^2 \right] \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_{x_i}^2} \ln \left( \frac{L_{x_f}}{L_{x_i}} \right). \quad (4.16)$$

Comparando la máquina térmica cuántica unidimensional y la bidimensional a través de las ecuaciones de fuerza adiabática (3.16 y 4.11), trabajo adiabático (3.17 y 4.12), fuerza isotérmica (3.19 y 4.15), trabajo isotérmico (3.20 y 4.16) y las restricciones de longitud para el proceso isotérmico (3.18 y 4.14) notamos como al condicionar la dirección  $y$  al estado base  $s = 1$ , o incluso a cualquier valor de  $s$  constante, la máquina térmica cuántica bidimensional presenta el mismo comportamiento que la unidimensional.

#### 4.1.2. MTC de Carnot bidimensional de dos estados.

Anteriormente, reproducimos el caso más simple de una MTC con dos estados, ahora extendemos nuestro análisis al caso bidimensional, con una partícula confinada en un pozo de potencial infinito bidimensional cuadrado de ancho inicial  $L_{xA}$ . Solo se toman en cuenta los primeros dos niveles de energía disponibles con  $n = 1, 2$  y  $s = 1$ , de esta manera, la condición de normalización en la ecuación 4.7 se convierte en  $|a_{1,1}|^2 + |a_{2,1}|^2 = 1$ . Siguiendo el ciclo de Carnot, el primer proceso corresponde a una expansión isotérmica partiendo el estado base con  $n, s = 1$ . La restricción de longitud durante la expansión se tiene de la ecuación 4.14 y queda como

$$L_x^2 = (|a_{1,1}|^2 + 4|a_{2,1}|^2) L_{xA}^2. \quad (4.17)$$

La máxima expansión ocurre cuando la partícula hace la transición completa desde el estado base con  $|a_{1,1}|^2 = 1$  y  $|a_{2,1}|^2 = 0$ , hasta el primer estado excitado con  $|a_{1,1}|^2 = 0$  y  $|a_{2,1}|^2 = 1$ , por lo que la expansión máxima se tiene en  $L_x = L_{xB} = 2L_{xA}$ .

Calculando el trabajo realizado en este proceso se obtiene

$$W_{A-B} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_{xA}^2} \ln(2). \quad (4.18)$$

Notamos que el trabajo realizado en este proceso es el mismo que el del caso unidimensional en la ecuación 3.22. Esto debido a que las expresiones de fuerza (3.19 y 4.15) y trabajo (3.20 y 4.16) resultan ser prácticamente las mismas en ambos casos.

Siguiendo el mismo desarrollo que el caso unidimensional que se ve desde la ecuación 3.23 hasta la 3.28, se realiza el ciclo expandiendo el sistema adiabáticamente hasta  $L_{xC} = \alpha L_{xB}$ , después comprimiendo isotérmicamente hasta  $L_{xD} = L_{xC}/2$  y, finalmente, comprimiendo el sistema adiabáticamente hasta la longitud inicial  $L_{xA}$ . Calculando el trabajo total  $W$  realizado a lo largo del ciclo y la eficiencia  $\eta$ , se obtiene que

$$W = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_{xA}^2} \ln(2) \left( 1 - \frac{1}{\alpha^2} \right), \quad (4.19)$$

$$\eta = 1 - \frac{1}{\alpha^2} = 1 - 4 \left( \frac{L_{xA}}{L_{xC}} \right)^2, \quad (4.20)$$

respectivamente, donde  $L_{xC} = 2\alpha L_{xA}$  es la longitud del pozo en su expansión máxima después del proceso de expansión adiabática y  $\alpha$  es un número real y mayor a uno, que representa la relación entre las longitudes  $L_{xB}$  y  $L_{xC}$  del pozo.

### 4.1.3. Generalización de la MTC de Carnot bidimensional de $n$ estados

Ahora consideramos un sistema con una partícula confinada en un pozo bidimensional cuadrado de longitud  $L_{x_A}$  en el que se pueden acceder a  $n'$  eigenestados diferentes donde  $s = 1$  y  $n = 1, 2, \dots, n'$ . Tomamos en cuenta que el pozo se puede expandir solo en la dirección  $x$  mientras la dirección  $y$  permanece fija. De esta manera la condición de normalización en la ecuación 4.7 se convierte en

$$|a_{1,1}|^2 + |a_{2,1}|^2 + \dots + |a_{n',1}|^2 = 1, \quad (4.21)$$

usando  $a_{1,1}(L_{x_A}) = 1$  y  $a_{2,1}(L_{x_A}) = \dots = a_{n',1}(L_{x_A}) = 0$ , la ecuación 4.14 queda como

$$L_x = (|a_{1,1}|^2 + 2^2|a_{2,1}|^2 + \dots + n'^2|a_{n',1}|^2) L_{x_A}^2. \quad (4.22)$$

Esto nos da una máxima expansión en  $L_{x_B} = n' L_{x_A}$  cuando la partícula hace la transición completa desde el estado base  $\phi_{1,1}$  hasta el  $n'$ -ésimo estado excitado  $\phi_{n',1}$ . De ésta manera, el trabajo realizado durante la expansión isotérmica, según la ecuación 4.16, queda como

$$W_{A-B} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_{x_A}} \ln(n'), \quad (4.23)$$

justo como el caso unidimensional de  $n$  estados en la ecuación 3.31. Siguiendo el mismo procedimiento para el caso unidimensional con las consideraciones del bidimensional se obtiene el trabajo realizado en cada uno de los procesos

$$W_{B-C} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_{x_A}^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right), \quad (4.24)$$

$$W_{C-D} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{m\alpha^2 L_{x_A}^2} \ln(n'), \quad (4.25)$$

$$W_{D-A} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_{x_A}^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right), \quad (4.26)$$

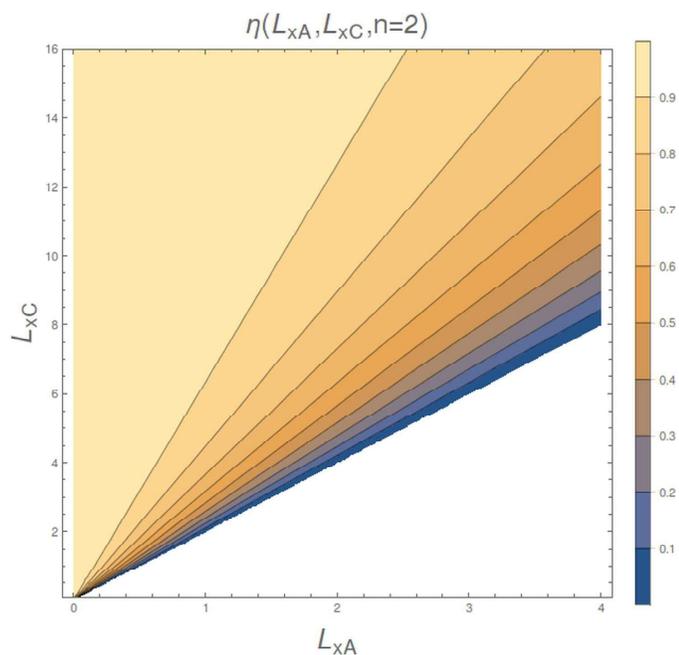
donde  $L_{x_C} = n'\alpha L_{x_A}$  es la longitud del pozo en su expansión máxima después del proceso de expansión adiabática y  $\alpha$  es un número real mayor a uno, que representa la relación entre las longitudes  $L_{x_B}$  y  $L_{x_C}$  del pozo. Así, el trabajo total es

$$W = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_A^2} \ln(n') \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right), \quad (4.27)$$

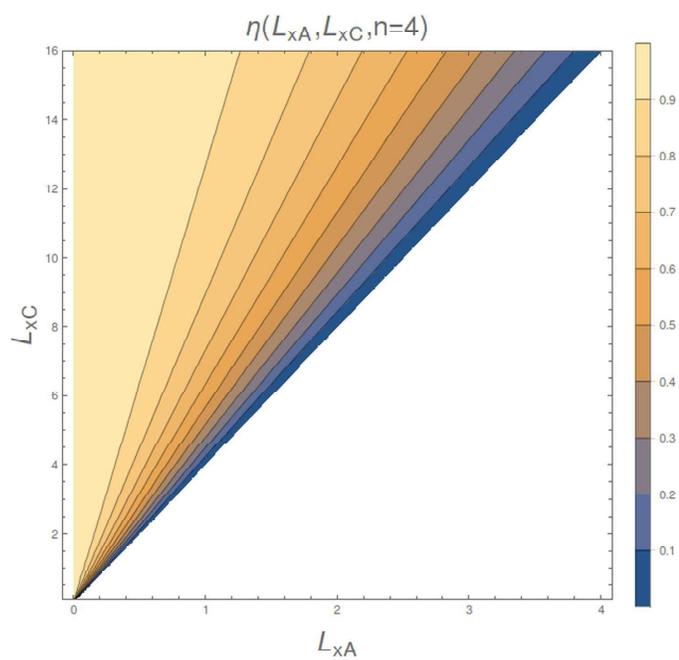
y la eficiencia de la MTC de Carnot bidimensional con  $n'$  estados es

$$\eta = 1 - \frac{1}{\alpha^2} = 1 - n'^2 \left(\frac{L_{x_A}}{L_{x_C}}\right)^2, \quad (4.28)$$

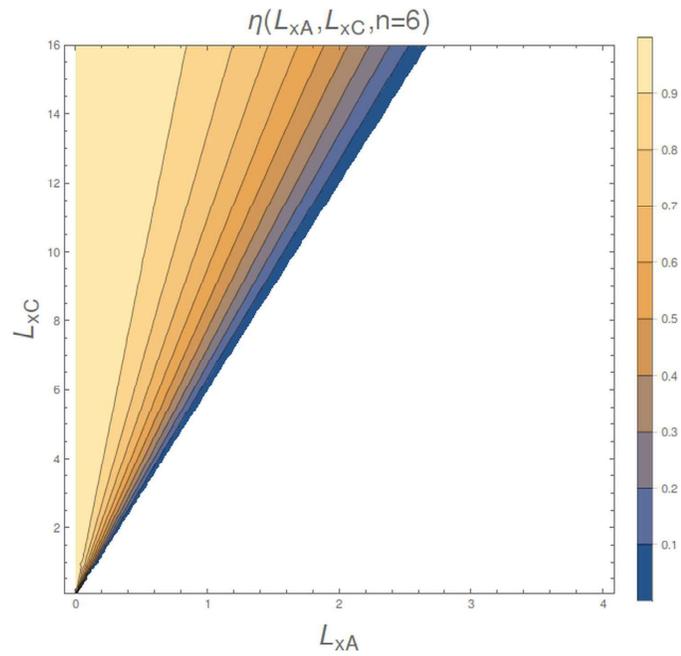
lo que muestra que tomando el caso bidimensional con cualquier número de estados, mientras se siga la consideración de mantener la longitud y el eigenestado asociado a una dirección del pozo fija y la otra dirección tenga la posibilidad de expandirse y contraerse, la máquina se comportará de la misma manera que una unidimensional. También se ve que si se maneja una misma relación entre la longitud inicial y la longitud total de expansión ( $L_{x_A}$  y  $L_{x_C}$ ), la eficiencia aumenta al manejar un menor número de estados disponibles, tal como se muestra en las figuras 4.1, 4.2, 4.3 y 4.4, se puede ver como con menor número de estados disponibles, el área de ( $L_{x_A}, L_{x_C}$ ) con eficiencias mayores a 0,9 es más grande. En cambio, al aumentar el número de estados disponibles, esta misma área disminuye y también el área de combinaciones de longitud inicial y de expansión total posibles.



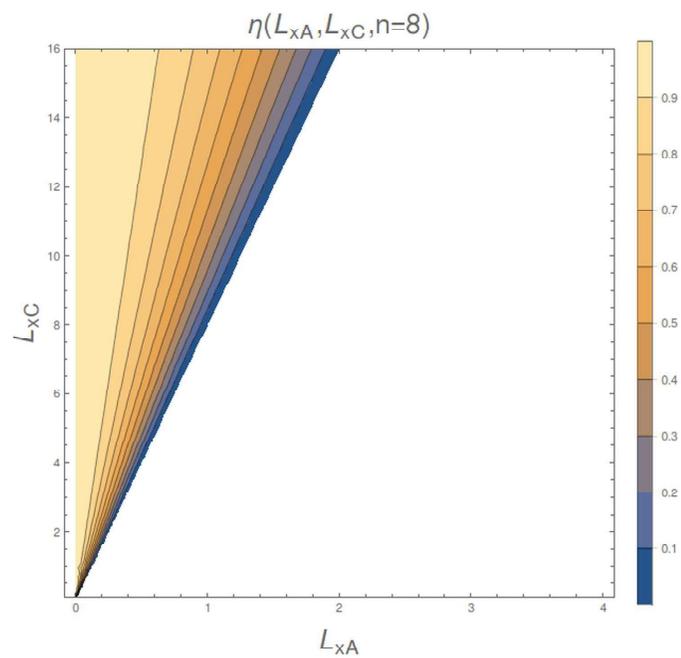
**Figura 4.1:** Mapa de contornos para la eficiencia de de una MTC con 2 niveles de energía disponibles en función de la longitud inicial  $L_{xA}$  y la longitud total de expansión  $L_{xC}$ .



**Figura 4.2:** Mapa de contornos para la eficiencia de de una MTC con 4 niveles de energía disponibles en función de la longitud inicial  $L_{xA}$  y la longitud total de expansión  $L_{xC}$ .



**Figura 4.3:** Mapa de contornos para la eficiencia de de una MTC con 6 niveles de energía disponibles en función de la longitud inicial  $L_{xA}$  y la longitud total de expansión  $L_{xC}$ .



**Figura 4.4:** Mapa de contornos para la eficiencia de de una MTC con 8 niveles de energía disponibles en función de la longitud inicial  $L_{xA}$  y la longitud total de expansión  $L_{xC}$ .

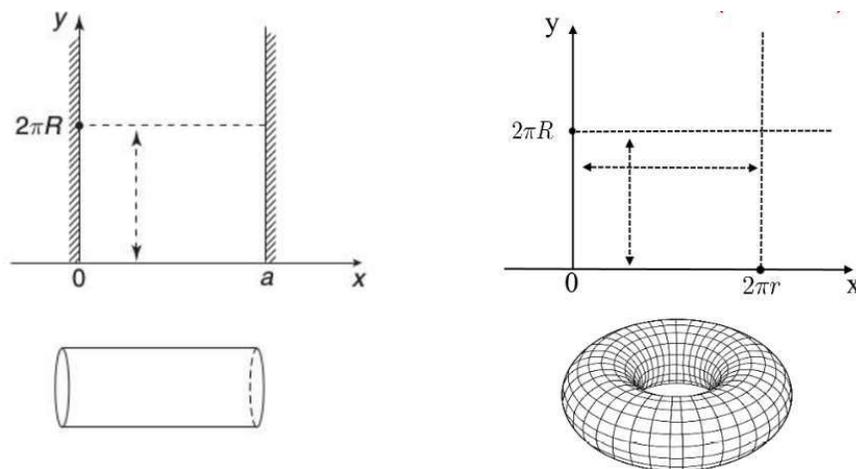
## 4.2. MTC en un confinamiento toroidal

Ahora consideramos que el pozo de potencial infinito bidimensional cuenta con periodicidad espacial en la función de onda en ambos ejes, esto se tiene al introducir las condiciones

$$\Psi(x, y) = (x + 2\pi r, y), \quad (4.29)$$

$$\psi(x, y) = (x, y + 2\pi R) \quad (4.30)$$

para así expresar en la función de onda que ésta debe ser igual cada  $2\pi r$  en la dirección  $x$  y cada  $2\pi R$  en la dirección  $y$ , análogo a la circunferencia de un círculo de radio  $r$  en  $x$  y a la circunferencia de un círculo de radio  $R$  en  $y$ . El resultado de estas dos periodicidades espaciales en la función de onda se puede ver como la superficie de un toro de radios  $R$  y  $r$ , como se muestra en la figura 4.5, donde se tiene como condición que  $R \geq r$ , pues  $R$  se considera como la distancia desde el centro del toro hasta el centro del tubo del toro, mientras que  $r$  es el radio interior del tubo.



**Figura 4.5:** Pozo bidimensional con radios de periodicidad  $r$  en la dirección  $x$  y  $R$  en la dirección  $y$  (Zwiebach, 2004).

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo está dada por la ecuación 4.1. Por separación de variables, la solución se puede escribir como  $\Psi(x, y) = \psi(x)\phi(y)$ , donde las condiciones de frontera ya no implican que la función de onda se anule en los extremos, sino que ahora, debido a la periodicidad, las nuevas condiciones son

$$\psi(x) = \psi(x + 2\pi r), \quad (4.31)$$

$$\phi(y) = \phi(y + 2\pi R) \quad (4.32)$$

Resolviendo el sistema con dichas condiciones, tal como en la ecuación 3.55, se obtienen las soluciones correspondientes a cada variable, de modo que

$$\psi_k(x) = a_k \sin\left(\frac{kx}{r}\right) + b_k \cos\left(\frac{kx}{r}\right), \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (4.33)$$

$$\phi_l(y) = c_l \sin\left(\frac{ly}{R}\right) + d_l \cos\left(\frac{ly}{R}\right), \quad l = 1, 2, 3, \dots \quad (4.34)$$

La solución general  $\Psi(x, y)$  se expresa como la combinación lineal de eigenfunciones  $\Psi_{k,l}(x, y) = \psi_k(x)\phi_l(y)$  y de eigenenergías  $E_{k,l}$ , dadas por

$$\Psi(x, y) = \sum_{k,l=1}^{\infty} a_{k,l} \psi_k(x) \phi_l(y), \quad (4.35)$$

$$E_{k,l} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left(\frac{k}{r}\right)^2 + \left(\frac{l}{R}\right)^2 \right]. \quad (4.36)$$

El valor de expectación del Hamiltoniano es

$$E = \sum_{k,l=1} |a_{k,l}|^2 E_{k,l} = \sum_{k,l=1} |a_{k,l}|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left(\frac{k}{r}\right)^2 + \left(\frac{l}{R}\right)^2 \right], \quad (4.37)$$

donde los coeficientes  $a_{k,l}$  cumplen con la condición de normalización

$$\sum_{k,l=1}^{\infty} |a_{k,l}|^2 = 1. \quad (4.38)$$

Ahora, se hace el mismo desarrollo de la MTC bidimensional de la sección 4.1 para el caso de la MTC toroidal. Primero, se obtienen las expresiones de la fuerza y el trabajo para los procesos isotérmicos y adiabáticos cuánticos necesarios en este caso.

En lugar de tener cuatro paredes, como en el pozo de potencial bidimensional infinito, tenemos la superficie de un toro, como en la figura 4.5, en la que podemos expandir o comprimir el área de la superficie a través de los radios  $r$  y  $R$ . Suponemos que podemos expandir uno de los radios, digamos  $r$ , una cantidad infinitesimal  $dr$ , entonces, al igual que en el caso bidimensional, la función de onda  $\Psi(x, y)$  y el valor de expectación del Hamiltoniano  $E$  también cambian infinitesimalmente. Definimos de esta manera la fuerza  $F$  ejercida para expandir el radio  $r$  como

$$F = -\frac{dE(r)}{dr}. \quad (4.39)$$

Para este análisis, al igual que el caso bidimensional, se considera un MTC en la que solo el radio  $r$  se expande y contrae, mientras que el radio  $R$  se mantiene constante, y la solución  $\phi_l(y)$  se mantiene en el estado base con  $l = 1$ . Basándonos en esta definición de la fuerza, resulta entonces que

$$F(r) = \left[ \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |a_{k,1}(r)|^2 \right] \frac{\hbar^2}{mr^3}, \quad (4.40)$$

donde los  $a_{k,1}(r)$  corresponden a los coeficientes con índices  $k$  y  $l = 1$ , para un pozo toroidal de radios  $R$  constante y  $r$  en expansión y compresión.

Se sigue el mismo procedimiento y consideraciones que el caso bidimensional de la sección 4.1 y se obtienen las expresiones de fuerza  $F_{adi}$  y trabajo  $W_{adi}$  para un proceso adiabático, esto es,

$$F_{Adi}(r) = \left[ \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |a_{k,1}(r_i)|^2 \right] \frac{\hbar^2}{mr^3}, \quad (4.41)$$

$$W_{Adi} = \left[ \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |a_{k,1}(r_i)|^2 \right] \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r_i^2} - \frac{1}{r_f^2} \right). \quad (4.42)$$

De la misma manera, se obtienen las expresiones para el proceso isotérmico al igual que las restricciones de expansión y compresión sobre el radio  $r$ . La restricción de radios durante la expansión isotérmica entre un radio inicial  $r_i$  y algún radio  $r$ , se obtiene igualando la ecuación 4.37 para ambos valores de radio, de modo que la restricción completa de radios en expansión es

$$r^2 = \frac{\sum_{k,l=1}^{\infty} k^2 |a_{k,l}(r)|^2}{\sum_{k,l=1}^{\infty} k^2 |a_{k,l}(r_i)|^2 + \left(\frac{r_i}{R}\right)^2 \sum_{k,l=1}^{\infty} l^2 [ |a_{k,l}(r_i)|^2 - |a_{k,l}(r)|^2 ]} r_i^2, \quad (4.43)$$

aplicando la condición  $l = 1$ , que es nuestro caso, y la condición de normalización de la ecuación 4.38, la expresión se reduce a

$$r^2 = \frac{\sum_k^{\infty} k^2 |a_{k,1}(r)|^2}{\sum_k^{\infty} k^2 |a_{k,1}(r_i)|^2} r_i^2. \quad (4.44)$$

La fuerza  $F_{iso}$  ejercida sobre la superficie durante el proceso isotérmico se obtiene sustituyendo  $r^2$  de la ecuación 4.44 en la ecuación 4.40, de modo que

$$F_{iso}(r) = \left[ \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |a_{k,1}(r_i)|^2 \right] \frac{\hbar^2}{mr_i^2 r}, \quad (4.45)$$

y el trabajo  $W_{iso}$  realizado en el proceso isotérmico desde un radio inicial  $r_i$  hasta

un radio final  $r_f$  es

$$W_{Iso} = \left[ \sum_{k=1}^{\infty} k^2 |a_{k,1}(r_i)|^2 \right] \frac{\hbar^2}{mr_i^2} \ln \left( \frac{r_f}{r_i} \right). \quad (4.46)$$

#### 4.2.1. Generalización de una MTC de Carnot en un confinamiento toroidal de $n$ estados

Consideramos un sistema con una partícula confinada a la superficie de un pozo de potencial infinito con forma toroidal de radio interior  $r_A$  y exterior  $R$ . Tomamos en cuenta que se pueden acceder a  $n$  eigenestados diferentes donde  $l = 1$  y  $k = 1, 2, \dots, n$ , y que el pozo puede modificar su superficie expandiendo solo el radio interior  $r$  mientras que el radio  $R$  permanece fijo. De esta manera la condición de normalización en la ecuación 4.38 se convierte en

$$|a_{1,1}|^2 + |a_{2,1}|^2 + \dots + |a_{n,1}|^2 = 1, \quad (4.47)$$

usando  $a_{1,1}(r_A) = 1$  y  $a_{2,1}(r_A) = \dots = a_{n,1}(r_A) = 0$ , la ecuación 4.44 queda como

$$r^2 = (|a_{1,1}|^2 + 2^2|a_{2,1}|^2 + \dots + n'^2|a_{n',1}|^2) r_A^2. \quad (4.48)$$

Esto nos da una máxima expansión en  $r_B = nr_A$  cuando la partícula hace la transición completa desde el estado base  $\Psi_{1,1}$  hasta el  $n$ -ésimo estado excitado  $\Psi_{n,1}$ . De esta manera, el trabajo realizado durante la expansión isotérmica, según la ecuación 4.46, queda como

$$W_{A-B} = \frac{\hbar^2}{mr_A^2} \ln(n), \quad (4.49)$$

bastante parecido al caso unidimensional de  $n$  estados en la ecuación 3.31. Siguiendo el mismo procedimiento para el caso unidimensional con las consideraciones del toro, se obtienen los trabajos realizado en cada uno de los procesos del ciclo, los cuales están dados por

$$W_{B-C} = \frac{\hbar^2}{2mr_A^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right), \quad (4.50)$$

$$W_{C-D} = -\frac{\hbar^2}{m\alpha^2 r_A^2} \ln(n), \quad (4.51)$$

$$W_{D-A} = -\frac{\hbar^2}{2mr_A^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right), \quad (4.52)$$

donde  $r_C = n\alpha r_A$  es el radio interior del toro en su expansión total después del proceso de expansión adiabática y  $\alpha$  es un número real mayor a uno, que representa la relación entre los radios  $r_B$  y  $r_C$ . Así, el trabajo total es

$$W = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_A^2} \ln(n) \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right), \quad (4.53)$$

y la eficiencia de la MTC de Carnot en un confinamiento toroidal con  $n$  estados es

$$\eta = 1 - \frac{1}{\alpha^2} = 1 - n^2 \left(\frac{r_A}{r_C}\right)^2, \quad (4.54)$$

lo que muestra que, al igual que el caso bidimensional en la ecuación 4.28, el comportamiento es bastante parecido a aquel de una MTC unidimensional con múltiples estados. También se ve que en caso de mantener una misma relación entre el radio interior inicial y el radio de expansión total ( $r_A$  y  $r_C$ ), la eficiencia de la MTC toroidal aumenta al reducir el número de estados accesibles para la partícula, tal como se ve en las figuras 4.1, 4.2, 4.3 y 4.4 para el caso bidimensional tomando en cuenta

que ambas ecuaciones de eficiencia (4.28 y 4.54) tienen la misma forma. Entonces, para el caso de una MTC de Carnot en un confinamiento toroidal también se cumple que al disminuir el número de estados disponibles  $n$ , el número de combinaciones  $(r_A, r_C)$  con eficiencias mayores a 0,9 aumenta, mientras que, al aumentar el número de estados disponibles, estas mismas combinaciones con mayor eficiencia disminuyen al igual que las combinaciones de radio interior inicial y de expansión total posibles.

### 4.3. Expansión óptima para una MTC de Carnot unidimensional con múltiples estados

Del trabajo de [Latifah and Purwanto \(2011\)](#), tenemos que, para una MTC de Carnot unidimensional de múltiples estados, las ecuaciones de eficiencia  $\eta$  y el trabajo  $W$  generado, que se desarrollan y detallan en la sección 3.4.1, son

$$\eta = 1 - \frac{k^2}{n^2\alpha^2}, \quad (4.55)$$

$$W = \frac{\pi^2\hbar^2}{mL_A^2} \left( \frac{k^2}{n^2\alpha^2} \right) \ln k, \quad (4.56)$$

respectivamente.

Haciendo un análisis a las ecuaciones 4.55 y 4.56 se obtiene lo siguiente. Dado un número fijo de estados disponibles  $n$ , y considerando una expansión completa del pozo hasta  $L_C = n\alpha L_A$ , se puede encontrar un valor de  $k' < n$  para la expansión isotérmica desde  $L_A$  hasta  $L_B = k' L_A$  que genere el mismo trabajo que el caso de una expansión isotérmica máxima hasta  $L_B = n L_A$ . Para esto, se evalúa la ecuación de

trabajo 4.56 para  $k = n$  (caso de expansión isotérmica máxima), y para  $k = k'$  (caso de expansión isotérmica menor). Al igualar estas expresiones, se obtiene que

$$\left[1 - \frac{1}{\alpha^2}\right] \ln n = \left[1 - \frac{k'^2}{n^2\alpha^2}\right] \ln k', \quad (4.57)$$

y se resuelve numéricamente para  $k'$ .

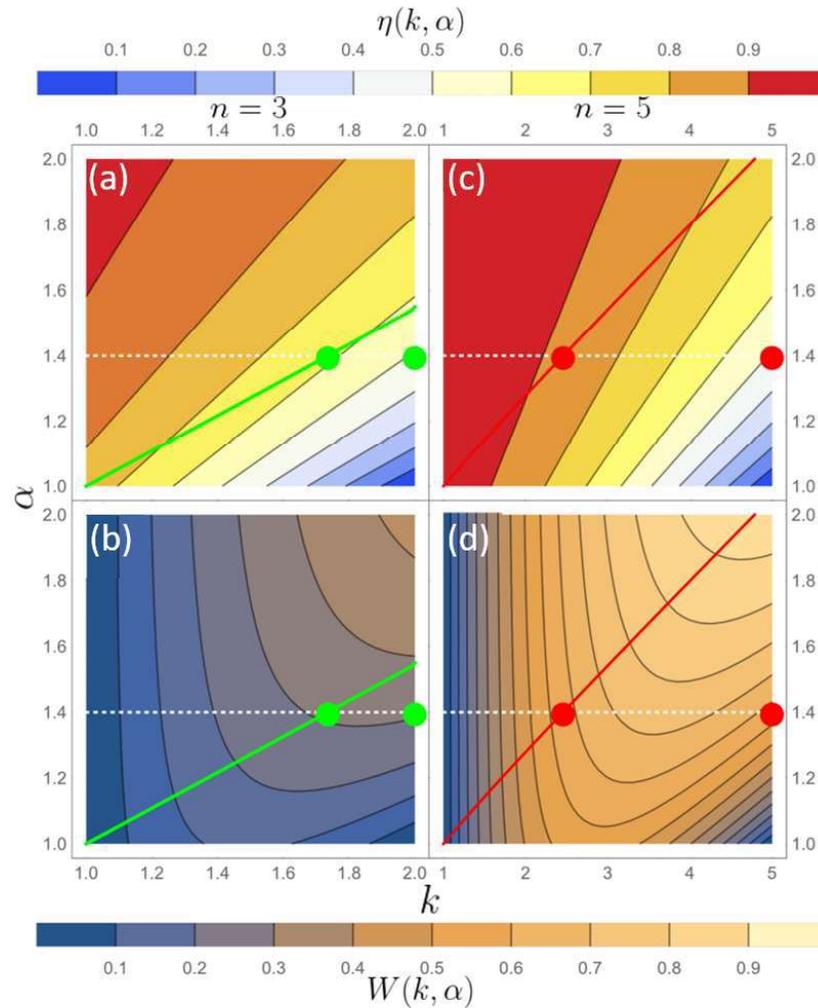
En la figura 4.3, se muestran los mapas de contornos para la eficiencia  $\eta$  y el trabajo  $W$  en los casos de una MTC con  $n = 3$  y  $n = 5$ . Se encontró que la eficiencia y el trabajo no dependen de la misma manera de que tanto se expande el sistema isotérmicamente ( $k$ ) o que tanta es la expansión completa al llegar a  $L_C$  ( $\alpha$ ).

Es posible ser más eficiente, como se muestra en las figuras 4.3a y 4.3b, si se reduce la expansión isotérmica (menor  $k$ ) mientras se incrementa la expansión total del pozo al llegar a  $L_C$  (mayor  $\alpha$ ), pero esto no aplica igual para el trabajo  $W$  generado.

Primero, para valores fijos de  $n$  y  $\alpha$  en los mapa de color del trabajo (véanse figuras 4.3b y 4.3d), al seguir las isocurvas que llegan al extremo derecho, es posible encontrar un valor  $k' < n$  que genera el mismo trabajo que el caso de  $k = n$  (expansión isotérmica máxima). Más aún, de lo mapas de contornos de eficiencia (véanse figuras 4.3a y 4.3c), resulta que ese valor de  $k' < n$ , con los mismos valores para  $\alpha$  y  $n$ , es más eficiente que el caso de  $k = n$ . Esto significa que hay una combinación óptima de expansión isotérmica hasta  $L_B = k'L_A$  y de expansión total  $L_C = n\alpha L_A$ , dado el número de estados disponibles y el trabajo que se desea generar.

También se observa, por comparación, que al aumentar el número de estados disponibles (mayor  $n$ ), los valores posibles de  $\alpha$ , con los que se puede encontrar un valor de  $k' < n$  que genere el mismo trabajo pero de manera más eficiente, también au-

mentan. Esto se puede ver con la curva verde de la figura 4.3b, que indica que, para valores fijos de  $\alpha > 1,6$  no existe valor  $k' < n$  que cumpla con la condición que nos interesa (mismo trabajo pero de manera más eficiente), mientras que la curva roja de la figura 4.3d muestra como ya aparecen valores de  $k' < n$  que si la cumplen.



**Figura 4.6:** Los mapas de contornos (a) y (b) representan eficiencia  $\eta$  y trabajo  $W$ , respectivamente, como función de  $\alpha$  y  $k$  para una MTC con 3 niveles de energía disponibles ( $n = 3$ ). La línea verde representa las combinaciones de  $(\alpha, k' < 3)$  que producen el mismo trabajo, con  $\alpha$  fija, que las combinaciones  $(\alpha, k = 3)$  de expansión isotérmica máxima. Los dos puntos verdes en (b) señalan dos combinaciones, una con  $k' < 3$  y otra con  $k = 3$ , ambas con un valor fijo  $\alpha = 1,4$  (línea blanca), que generan el mismo trabajo, pero de (a) es claro que el punto en  $k' < 3$  es más eficiente. Los mapas de contornos (c) y (d) representan  $\eta$  y  $W$ , respectivamente, como función de  $\alpha$  y  $k$  para una MTC con 5 niveles de energía disponibles ( $n = 5$ ). La línea roja representa las combinaciones de  $(\alpha, k' < 5)$  que producen el mismo trabajo, con  $\alpha$  fija, que las combinaciones  $(\alpha, k = 5)$  de expansión isotérmica máxima. Los dos puntos rojos en (d) señalan dos combinaciones, una con  $k' < 5$  y otra con  $k = 5$ , ambas con un valor fijo  $\alpha = 1,4$  (línea blanca), que generan el mismo trabajo, pero de (a) es claro que el punto en  $k' < 5$  es más eficiente.

# Capítulo 5

## Conclusiones

Se propuso un pozo de potencial infinito con geometría toroidal y se resolvió analíticamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula confinada en este sistema, encontrando las eigenfunciones y eigenenergías correspondientes. También se logró obtener las expresiones generalizadas de fuerza, trabajo y restricciones en longitud (y radio) para máquinas térmicas cuánticas de Carnot en sistemas cuánticos con superposición de  $n$  estados. Específicamente, para el sistema de una partícula confinada en un pozo bidimensional cuadrado de potencial infinito y un pozo toroidal de potencial infinito. Finalmente, para estos sistemas, se obtuvieron las ecuaciones de eficiencia correspondientes, encontrando que bajo las consideraciones propuestas, ambos sistemas presentan un comportamiento semejante al de una MTC unidimensional de  $n$  estados reportado por [Latifah and Purwanto \(2011\)](#). Un resultado importante que revelan las ecuaciones es que al trabajar con sistemas con múltiples estados, si se mantiene una misma relación entre las longitudes originales y las longitudes de expansión final de los sistemas, la eficiencia aumenta al reducir el número de estados disponibles para la partícula confinada.

Se consiguió un resultado importante a partir de las ecuaciones para una MTC de Carnot unidimensional con múltiples estados, reportadas por [Latifah and Purwanto \(2011\)](#), donde se obtuvo que existe una combinación óptima, de expansión isotérmica y expansión total del pozo, para obtener una misma cantidad de trabajo de manera más eficiente al mantener el sistema en superposición la mayor parte del ciclo.

## Trabajo a futuro

Se contempla ahora la posibilidad de acoplar ciclos en una MTC, de modo que se pueda aprovechar la expansión de la dirección que en este trabajo se mantiene constante para manejar dos ciclos termodinámicos al mismo tiempo. También se puede seguir y ampliar el desarrollo obtenido considerando partículas con espín, como en el trabajo reportado por [Wang et al. \(2007\)](#) e introducir el fenómeno de superposición de estados en la partícula a lo largo de los ciclos.

Otra área a desarrollar en el futuro puede ser el análisis profundo de otras geometrías para pozos, tal como el cilindro, y ver como afecta la periodicidad de los sistemas en sus eficiencias.

# Bibliografía

- Anelli, P. L., Spencer, N., and Stoddart, J. F. (1991). A molecular shuttle. *Journal of the American Chemical Society*, 113(13):5131–5133.
- Baglione, M. L. (2007). Development of system analysis methodologies and tools for modeling and optimizing vehicle system efficiency.
- Bender, C. M., Brody, D. C., and Meister, B. K. (2000). Quantum mechanical carnot engine. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 33(24):4427.
- Binnig, G., Quate, C. F., and Gerber, C. (1986). Atomic force microscope. *Physical Review Letters*, 56(9):930.
- Binnig, G., Rohrer, H., Gerber, C., and Weibel, E. (1982). Surface studies by scanning tunneling microscopy. *Physical Review Letters*, 49(1):57.
- Branca, G. (1990). *Le machine volume nuouo et di molto artificio da fare effetti marauigliosi tanto spirituali quanto di animale operatione arichito di bellissime figure con le dichiarazioni a ciascuna di esse in lingua uolgare et latina del sig. r Giouanni Branca cittadino romano ingegniero...* ad istanza di Iacomo Marcuci in piazza Nauona.

- Carnot, S. (1824). *Réflexions sur la Puissance Motrice du Feu et sur les Machines Propres à Développer Cette Puissance* (Bachelier, Paris), [Reflections on the Motive Power of Fire and on Machines Fitted to Develop That Power]. French.
- Chen, J., Lin, B., and Hua, B. (2002). The performance of a quantum heat engine working with spin systems. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 35(16):2051.
- Curzon, F. and Ahlborn, B. (1975). Efficiency of a carnot engine at maximum power output. *American Journal of Physics*, 43(1):22–24.
- De La Peña, L. (2014). *Introducción a la mecánica cuántica*. Fondo de Cultura económica.
- Dietrich-Buchecker, C. O., Sauvage, J., and Kintzinger, J. (1983). Une nouvelle famille de molécules: les metallo-catenanes. *Tetrahedron letters*, 24(46):5095–5098.
- Eisberg, R. M., Resnick, R., Cota Araiza, L., et al. (1994). *Física cuántica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*.
- Feynman, R. P. (2012). There’s plenty of room at the bottom: An invitation to enter a new field of physics. In *Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology, Third Edition*, pages 26–35. CRC Press.
- Koumura, N., Zijlstra, R. W., van Delden, R. A., Harada, N., and Feringa, B. L. (1999). Light-driven monodirectional molecular rotor. *Nature*, 401(6749):152.
- Kudernac, T., Ruangsupapichat, N., Parschau, M., Maciá, B., Katsonis, N., Harutyunyan, S. R., Ernst, K.-H., and Feringa, B. L. (2011). Electrically driven directional motion of a four-wheeled molecule on a metal surface. *Nature*, 479(7372):208.

- Latifah, E. and Purwanto, A. (2011). Multiple-state quantum carnot engine. *Journal of Modern Physics*, 2(11):1366.
- Quan, H., Liu, Y.-x., Sun, C., and Nori, F. (2007). Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. *Physical Review E*, 76(3):031105.
- Quan, H. T. (2009). Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. ii. *Physical Review E*, 79(4):041129.
- Scovil, H. and Schulz-DuBois, E. (1959). Three-level masers as heat engines. *Physical Review Letters*, 2(6):262.
- Sears, F. W., Ford, A. L., and Freedman, R. A. (2005). *Física universitaria: con física moderna*. volumen 2. Pearson educación.
- Thurston, R. H. (1887). *A History of the Growth of the Steam-Engine*. Number 24. Kegan Paul.
- Vettiger, P., Despont, M., Drechsler, U., Durig, U., Haberle, W., Lutwyche, M. I., Rothuizen, H. E., Stutz, R., Widmer, R., and Binnig, G. K. (2000). The “millipede”—more than thousand tips for future afm storage. *IBM Journal of Research and Development*, 44(3):323–340.
- Wang, J., He, J., and Xin, Y. (2007). Performance analysis of a spin quantum heat engine cycle with internal friction. *Physica Scripta*, 75(2):227.
- Zemansky, M. and Dittman, D. (1997). Heat and thermodynamics, 1997. *McGraw-Hill, New York, NY*, 10020.
- Zwiebach, B. (2004). *A first course in string theory*. Cambridge university press.