

Tesis de Grado

Intercambio de calor y trabajo en nanoestructuras fonónicas forzadas

Gresta, Daniel Matías

2017

Este documento forma parte de las colecciones digitales de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en bibliotecadigital.exactas.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the digital collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in bibliotecadigital.exactas.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Gresta, Daniel Matías. (2017). Intercambio de calor y trabajo en nanoestructuras fonónicas forzadas. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
https://hdl.handle.net/20.500.12110/seminario_nFIS000020_Gresta

Cita tipo Chicago:

Gresta, Daniel Matías. "Intercambio de calor y trabajo en nanoestructuras fonónicas forzadas". Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2017.
https://hdl.handle.net/20.500.12110/seminario_nFIS000020_Gresta

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires

Intercambio de calor y trabajo en nanoestructuras fonónicas forzadas

Alumno

DANIEL MATÍAS GRESTA

Directora

LILIANA ARRACHEA

Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas

Departamento de Física- Facultad de Cs. Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

MARZO 2017

Tema: Intercambio de calor y trabajo en nanoestructuras fonónicas forzadas

Alumno: Daniel Matías Gresta

Libreta universitaria No: 236/11

Lugar de Trabajo: International Center for Advanced Studies - Universidad de San Martín - Escuela de Ciencia y Tecnología

Directora: Liliana Arrachea

Fecha de iniciación: Abril 2016

Fecha de finalización: Marzo 2017

Fecha de examen

Informe final aprobado por

ALUMNO: DIRECTOR:

JURADO: JURADO:

JURADO:

PROFESOR DE LA TESIS:

AGRADECIMIENTOS

*If I have seen further it is by
standing on the shoulder of
Gigants*

Sir Isaac Newton

Escribir estas palabras para mí significan el fin de esta etapa y el comienzo de una nueva. Uno no se recibe solo. Hay mucha gente detras bancándote más cuando la carrera dura siete años. Me gustaría agradecer a mi directora Lili por formarme en estos últimos años y hacer que me interese una rama de la física que de otra forma hubiera pasado desapercibida para mí. Y también por darme la oportunidad de seguir con ella en el doctorado.

A mis viejos, mi hermano y mis abuelos por estar incondicionalmente. En particular a mi abuela por recibirme durante todo este tiempo y mi hermano Lucas por ayudarme hasta con lo más pavo y ponerse siempre con buena predisposición.

A amigos que hice en este tiempo, como José, Fer y Agos. Siempre es un gusto hablar y compartir buenos momentos con ellos. A José un gracias también por darme una mano es estos últimos tiempos.

También a Ros por ser una gran compañera.

Finalmente a una pequeñita persona que su sonrisa me alegra los días, mi Sofi.

Gracias

ÍNDICE

	Página
Resumen	1
1 Marco teórico	3
1.1 Caso de interés: oscilador armónico en equilibrio	3
1.2 Funciones de Green en no equilibrio: Propiedades y definiciones	6
1.2.1 Teorema de Langreth	8
1.3 Modelado del problema	8
2 Análisis termodinámico del problema dependiente del tiempo	13
2.1 Análisis termodinámico	13
2.2 Análisis cinético, definición de flujos de calor y trabajo	15
2.2.1 Expansión adiabática	16
2.3 Eficiencia de máquinas y bombas térmicas	18
3 Resolución del problema: modelos y resultados	21
3.1 Planteo del problema con el formalismo las funciones de Green	21
3.2 Modelos estudiados y resultados	25
3.3 Conclusiones	43
A Apéndices	45
A.1 Código utilizado	45
A.2 Gráfico de coeficientes	57
Bibliografía	65

RESUMEN

El objetivo de la presente tesina es estudiar el transporte de calor y la extracción de trabajo en un sistema fonónico cuando este es forzado con potenciales externos. Ya se han analizado situaciones similares, por ejemplo en [1] se mostró como obtener los flujos de calor y energía para un sistema fonónico. En [2] se analizó un sistema de enfriamiento fonónico en el cual se tenía una perturbación que se desplazaba a lo largo de la parte central del sistema. Se mostró que cuando la temperatura de ambos reservorios tendía ser la misma, la eficiencia tendía al límite de Carnot y se obtiene $2/3$ de la eficiencia de Carnot cuando la temperatura del reservorio frío era dos veces menor que la del caliente para sistemas 1D. En esta tesina se van a estudiar estos sistemas guiado por el enfoque de [3]. En dicho trabajo se analiza un sistema de electrones bajo la acción de potenciales periódicos. Se obtiene la producción de calor, entropía y energía a lo largo de un ciclo y se obtiene la eficiencia del sistema.

El trabajo se divide de la siguiente forma: en el capítulo 1 es una introducción a las funciones de Green y al formalismo de Keldysh. Como ejemplo se resuelve en dicho formalismo el oscilador armónico 1-D; en el capítulo 2 se hace un análisis termodinámico del sistema, guiado por la referencia [4], cuando este tiene un potencial periódico externo aplicado. Se identifican corrientes de energía, trabajo intercambiado, producción de entropía y se obtiene la eficiencia del sistema como motor y bomba. En el capítulo 3 se aplicará lo expuesto anteriormente para obtener expresiones mediante el formalismo de Green para las corrientes, potencia y eficiencia. Luego se discuten algunas configuraciones y se analizan las eficiencias de las mismas.

MARCO TEÓRICO

The career of a young theoretical physicist consists of treating the harmonic oscillator in ever increasing levels of abstraction

Sidney Coleman

Las funciones de Green de no equilibrio son a menudo usados para calcular densidades de carga y corriente en conductores a escalas nanométricas. En este capítulo se presentan las ideas principales de las funciones de Green. En la sección 1.1 se resuelve el caso de interés que va a servir para todo este trabajo; el oscilador armónico cuántico. En la sección 1.2 se presentan las ideas básicas del formalismo de no equilibrio de las funciones de Green [5–7] y un resultado teórico importante; el teorema de Langreth. Finalmente en la sección 1.3 se resuelve el problema de varios osciladores acoplados fuera del equilibrio obteniendo una expresión para el flujo de energía que es la magnitud de interés en esta parte del problema.

1.1 Caso de interés: oscilador armónico en equilibrio

En esta sección se va a resolver el oscilador armónico cuántico con un solo grado de libertad [8, 9] y se van a ir definiendo conceptos que van a ser utilizados a lo largo de este trabajo. El Hamiltoniano de un oscilador armónico es

$$(1.1) \quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2,$$

siendo x el desplazamiento, p el momento conjugado tal que $[x, p] = xp - px = i\hbar$, \hbar la constante de Planck reducida, m la masa de la partícula y k la constante del resorte. Haciendo un cambio

de variables $u = x\sqrt{m}$ el Hamiltoniano 1.1 se puede reescribir como

$$(1.2) \quad H = \frac{1}{2}\dot{u}^2 + \frac{1}{2}\Omega^2 u^2 = \hbar\Omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right),$$

donde $\Omega^2 = \frac{k}{m}$ es la frecuencia característica y donde el desplazamiento normalizado se escribe en términos de los operadores de creación y destrucción como

$$(1.3) \quad u = \sqrt{\frac{\hbar}{2\Omega}} (a^\dagger + a),$$

donde $[a, a^\dagger] = 1$. En el marco de Heisenberg los operadores evolucionan en el tiempo y los estados no cambian. La ecuación de movimiento para a toma una forma muy simple

$$(1.4) \quad \frac{da(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [a(t), H] = -i\Omega a(t),$$

Esto da una solución oscilatoria $a(t) = ae^{-i\Omega t}$ y por lo tanto la solución para u se obtiene fácilmente. La cuestión es cómo introducir la temperatura al modelo.

En la representación de auto estados se tiene

$$\begin{aligned} H |n\rangle &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\Omega |n\rangle, \\ a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \end{aligned}$$

y utilizando las reglas de conmutación y que

$$(1.5) \quad \langle n \rangle = \langle a^\dagger a \rangle = B(T, \Omega),$$

donde $B(T, \Omega) = [e^{\hbar\Omega/k_B T} - 1]^{-1}$ es la distribución de Bose a temperatura T y frecuencia Ω , se llega a

$$(1.6) \quad \langle aa \rangle = \langle a^\dagger a^\dagger \rangle = 0,$$

$$(1.7) \quad \langle a^\dagger a \rangle = B, \quad \langle aa^\dagger \rangle = 1 + B.$$

Se define la función de Green mayor como

$$(1.8) \quad g^>(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \langle u(t)u(t') \rangle,$$

Usando las relaciones entre u y a y los promedios de los operadores de creación y destrucción se obtiene

$$(1.9) \quad g^>(t, t') = \frac{1}{2\Omega i} \left[B e^{i\Omega(t-t')} + (1+B) e^{-i\Omega(t-t')} \right],$$

Hay que notar que $g^>$ no es una función de dos variables t, t' , sino de una sola $t - t'$. Esto va a ser así si el sistema está en un estado de equilibrio térmico o un estado estacionario de no equilibrio.

En este caso, la función de Green no es más que una función de correlación en el tiempo. También se definen la función menor de Green

$$(1.10) \quad g^<(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \langle u(t')u(t) \rangle = g^>(t', t),$$

la función t -ordenada (o casual)

$$(1.11) \quad g^t(t, t') = \frac{-i}{\hbar} \langle \mathcal{T} u(t')u(t) \rangle = \Theta(t-t')g^>(t, t') + \Theta(t'-t)g^<(t, t'),$$

y la anti t -ordenada

$$(1.12) \quad g^{t^*}(t, t') = \frac{-i}{\hbar} \langle \mathcal{T}^* u(t')u(t) \rangle = \Theta(t'-t)g^>(t, t') + \Theta(t-t')g^<(t, t'),$$

con $\Theta(t)$ la función de Heaviside y \mathcal{T} y \mathcal{T}^* son los operadores que ordenan temporal o anti temporalmente. La posición de los operadores es tal que el operador en la derecha es el que ocurre primero siguiendo el orden temporal a medida que se avanza de derecha a izquierda. El anti-temporal es el contrario. Estas cuatro funciones determinan lo que se llama «contorno ordenado de la función de Green» que son de gran utilidad cuando se trabaja en situaciones de no equilibrio. Otro par importante de funciones son la función de Green retardada

$$(1.13) \quad g^r(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \langle [u(t), u(t')] \rangle = -\Theta(t-t') \frac{\sin \Omega(t-t')}{\Omega},$$

y la avanzada

$$(1.14) \quad g^a(t, t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t'-t) \langle [u(t), u(t')] \rangle.$$

donde la función de Green retardada es solución de

$$(1.15) \quad \frac{d^2}{dt^2} g^r(t) + \Omega^2 g^r(t) = -\delta(t),$$

con la condición $g^r(t) = 0$ si $t < 0$.

Muchas veces suele ser más práctico trabajar en el espacio de frecuencias, sobre todo si hay invariancia ante traslación temporal. Para esto se transforma en Fourier

$$(1.16) \quad g^r(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt g^r(t) e^{i\omega t} \quad ; \quad g^r(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} g^r(\omega) e^{-i\omega t}.$$

De esta forma la transformada de Fourier de la función de Green retardada es

$$(1.17) \quad g^r(\omega) = \int dt \Theta(t) \frac{\sin \Omega t}{\Omega} e^{i\omega t - \eta t} = \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - \Omega^2},$$

donde η es una variable real que se introduce por motivos de convergencia y luego se la hace tender a cero, $\eta \rightarrow 0^+$. De la misma forma, la función de Green menor es

$$(1.18) \quad g^<(\omega) = -\frac{i\pi}{\Omega} [B\delta(\omega - \Omega) + (1+B)\delta(\omega + \Omega)],$$

o usando la relación de Sokhotski-Plemelj

$$(1.19) \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_a^b \frac{f(x)}{x \pm i\epsilon} dx = \mp i\pi f(0) + \mathcal{P} \int_a^b \frac{f(x)}{x} dx,$$

con \mathcal{P} el valor principal de Cauchy, la función menor de Green se lee como

$$(1.20) \quad g^<(\omega) = B(\omega)(g^r(\omega) - g^a(\omega)).$$

De forma análoga se puede demostrar que

$$(1.21) \quad g^<(\omega) = \frac{B(\omega)}{B(\omega) + 1} g^>(\omega),$$

1.2 Funciones de Green en no equilibrio: Propiedades y definiciones

La idea es ahora generalizar los conceptos previos a un sistema con más de un grado de libertad. Entonces se definen los elementos de matriz como

$$(1.22) \quad G_{i,j}^>(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr} [\rho(t_0) u_i(t) u_j(t')],$$

donde la traza es sobre un set completo de autoestados, $u_i(t)$ es el operador de desplazamiento en el marco Heisenberg dado por

$$(1.23) \quad u_i(t) = e^{i(t-t_0)H/\hbar} u_j e^{-i(t-t_0)H/\hbar},$$

donde u_j es el operador asociado al marco de Schrödinger y H es el Hamiltoniano del sistema. Si el Hamiltoniano tiene dependencia explícita temporal, es necesario reemplazar las exponenciales anteriores por el operador de evolución temporal

$$(1.24) \quad \begin{aligned} U(t, t_0) &= T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau \right); \quad t > t_0 \\ u_i(t) &= U(t_0, t) u_j U(t, t_0). \end{aligned}$$

La matriz densidad de 1.22 está evaluada a tiempo t_0 . Dado que $\rho(t_0)$ es arbitrario, el sistema en general está en un estado de no equilibrio y por lo tanto va a depender tanto de los tiempos t y t' y no simplemente de la diferencia. El significado de no equilibrio es que $\rho(t_0)$ no está descrito por distribución canónica, $\propto e^{-\beta H}$ o que el Hamiltoniano tiene una dependencia temporal explícita y el tiempo t_0 de referencia es arbitrario.

Las otras funciones de Green tienen su definición análoga, por ejemplo, la menor

$$(1.25) \quad G_{i,j}^<(t, t') = -G_{j,i}^>^*(t', t),$$

la función retardada

$$(1.26) \quad G_{i,j}^r(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \text{Tr} \{ \rho(t_0) [u_i(t), u_j(t')] \} = \Theta(t-t') [G_{i,j}^>(t, t') - G_{i,j}^<(t, t')],$$

y la avanzada

$$(1.27) \quad G_{i,j}^a(t, t') = G_{j,i}^r(t', t)$$

A su vez, las cuatro están relacionadas por

$$(1.28) \quad G^r - G^a = G^> - G^< ,$$

A estas relaciones se le puede sumar una más que se tiene en el espacio de Fourier

$$(1.29) \quad G^a(\omega) = G^{r,\dagger}(\omega),$$

donde \dagger indica el hermítico conjugado.

El siguiente paso es encontrar la dinámica de las funciones de Green de no equilibrio. Las ecuaciones de Dyson que definen a la función de Green son

$$(1.30) \quad \begin{pmatrix} \epsilon - H_L & -H_{LC} & 0 \\ -H_{LC}^\dagger & \epsilon - H_C & -H_{RC} \\ 0 & H_{RC}^\dagger & \epsilon - H_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_L & G_{LC} & 0 \\ G_{CL} & G_c & G_{CR} \\ 0 & G_{RC} & G_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Explicitando cada ecuación se obtienen las ecuaciones de Dyson del problema. Por ejemplo,

$$(1.31) \quad G_c^r = g_0^r + G_c^r \Sigma_R^r g_0^r + G_c^r \Sigma_L^r g_0^r,$$

donde se definió la auto energía

$$(1.32) \quad \Sigma_\alpha^r = H_{c\alpha} g_\alpha^r H_{\alpha c}^\dagger,$$

con $\alpha = L, R$ y g_0 es la solución al problema $(\epsilon - H_c)g_0 = 1$. Vale aclarar que el único elemento no nulo de Σ_α es (α, α) donde α hace referencia al término de contacto entre el reservorio y la parte central, es decir, en el caso de la cadena 1-D con un reservorio a cada extremo, cuando $\alpha = L$ el elemento no nulo es $(1,1)$ y cuando $\alpha = R$ el elemento no nulo es (N, N) con N el tamaño del sistema.

No hay que perder de vista que esta es una notación esquemática y sencilla que lo que quiere decir es

$$(1.33) \quad G_c^r(t, t') = g_0^r(t, t') + \sum_\alpha \int dt_1 dt_2 G_c^r(t, t_1) \Sigma_\alpha^r(t_1, t_2) g_0^r(t_2, t'),$$

o equivalentemente

$$(1.34) \quad G^r = \left(g_0^{r,-1} - \Sigma_L^r - \Sigma_R^r \right).$$

Antes de proseguir es conveniente introducir algunos resultados teóricos que van a ser de utilidad más tarde y concierne con el tratamiento de productos de funciones de Green. Estos resultados son conocidos como el teorema de Langreth

1.2.1 Teorema de Langreth

Al considerar la ecuación de Dyson 1.31 aparecen estructuras de tipo $C = AB$ o $C(t, t') = \int dt_1 A(t, t_1)B(t_1, t)$ y sus generalizaciones al producto de tres o más. El teorema establece que

$$(1.35) \quad C^<(t, t') = \int d\tau A^r(t, \tau)B^<(\tau, t') + \int d\tau A^<(t, \tau)B^a(\tau, t)$$

Si se tuviera un producto de tres $D = ABC$

$$(1.36) \quad D^< = A^r B^r C^< + A^r B^< C^a + A^< B^a C^a,$$

y la retardada

$$(1.37) \quad C^r(t, t') = \int d\tau A^r B^r,$$

y lo mismo si se tuviera un producto de tres $D^r = A^r B^r C^r$.

Para terminar esta sección se van a utilizar las reglas de Langreth para obtener $G^<$. Entonces aplicando la regla a la ecuación 1.31 se obtiene

$$(1.38) \quad G^< = g_0^< + g^r \Sigma^r G^< + g^r \Sigma^< G^a + g^< \Sigma^a G^a.$$

Usando la ecuación de Dyson para la función de Green retardada y avanzada y despejando se llega a [10, 11]

$$(1.39) \quad G^< = (1 + G^r \Sigma^r) g_0^< (1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^< G^a.$$

En general el primer término de 1.39 importa para el estudio del transitorio así que sólo basta con conservar el segundo término y es lo que se va a hacer de acá en adelante

$$(1.40) \quad G^< = G^r \Sigma^< G^a.$$

También en el resto del presente trabajo se utilizarán unidades donde $\hbar = k_B = 1$.

1.3 Modelado del problema

Ya habiendo introducido resultados sobre las funciones de Green y algunas de sus propiedades, se va a pasar a resolver el problema donde se tienen dos reservorios, modelados por cadenas infinitas de osciladores armónicos, en equilibrio termodinámico, que interactúan con una parte central, fuera de equilibrio y también modelado como una cadena de osciladores osciladores acoplados. Estos representan las vibraciones de los iones de una red de una nanoestructura sólida. El modelo también puede aplicarse a las vibraciones de una red artificial de iones atrapados, en cuyo caso los reservorios representarían los fotones de los láseres. A continuación se seguirá el lineamiento de las referencias [1, 2]. En lo que sigue se resumen los principales pasos.

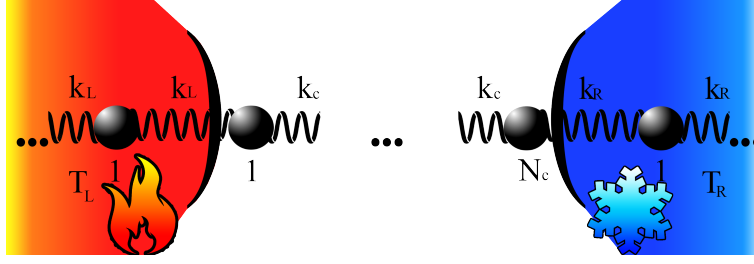


FIGURA 1.1. Diagrama del sistema bajo consideración- La numeración de las partículas en el reservorio izquierdo es de derecha a izquierda. Las de la parte central y reservorio derecho se numeran de izquierda a derecha. El reservorio izquierdo se encuentra a temperatura T_L y el derecho a temperatura T_R tales que $T_L > T_R$. Si bien esta última hipótesis no es necesaria, se va a considerar este caso en las simulaciones numéricas

El Hamiltoniano está descrito por

$$(1.41) \quad H = \sum_{\alpha} (H_{\alpha} + H_{c\alpha}) + H_c,$$

donde

$$(1.42) \quad H_v = \sum_l^N \frac{p_{v,l}^2}{2m_v} + \sum_{l=1}^{N_v-1} \frac{k_v}{2} (x_{v,l} - x_{v,l+1})^2,$$

con $v = \alpha, c$ y $\alpha = L, R$ denota a reservorios del lado izquierdo y derecho respectivamente y c la parte central, N_v indica la cantidad de osciladores que hay en cada sistema. Luego se considerará el límite $N_{\alpha} \rightarrow \infty$ mientras que N_c se lo considerará finito y

$$(1.43) \quad H_{c\alpha} = \frac{k_{\alpha}}{2} (x_{\alpha} - x_c)^2.$$

Las masas son numeradas de la siguiente forma: las del reservorio izquierdo se numeran de derecha a izquierda; las de la parte central y reservorio derecho se numeran de izquierda a derecha. Bajo esta convención la partícula 1 del reservorio izquierdo está en contacto con la partícula 1 de la parte central y la partícula N_c de la parte central con la 1 del reservorio derecho (ver figura 1.1).

Es conveniente pasar a modos normales. Para condiciones de contorno abiertas esto corresponde a realizar la siguiente transformación [1, 2]

$$(1.44) \quad x_{\alpha,l} = \sqrt{\frac{2}{N_{\alpha} + 1}} \sum_{n=0}^{N_{\alpha}} \sin(q_n^{\alpha} l) x_{\alpha,n},$$

$$(1.45) \quad p_{\alpha,l} = \sqrt{\frac{2}{N_{\alpha} + 1}} \sum_{n=0}^{N_{\alpha}} \sin(q_n^{\alpha} l) p_{\alpha,n},$$

$$(1.46) \quad q_n^{\alpha} = \frac{n\pi}{N_{\alpha} + 1}.$$

Esto hace que el Hamiltoniano se transforme en

$$(1.47) \quad H_\alpha = \sum_n \left\{ \frac{p_{\alpha,n}^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} 2k_\alpha [1 - \cos q_n^\alpha] x_{\alpha,n}^2 \right\},$$

y la energía de cada modo

$$(1.48) \quad E_{\alpha,n} = \sqrt{\frac{2k_\alpha}{m_\alpha} [1 - \cos q_n^\alpha]},$$

con $n = 1, \dots, N_\alpha$ y $\alpha = L, C, R$.

Una magnitud de interés es el flujo de energía que hay entre las diferentes partes del Hamiltoniano, en particular como es la variación de energía de los reservorios descrito por los Hamiltonianos H_L y H_R a la parte central H_c . Se define la corriente como

$$J_\alpha = \langle \dot{H}_\alpha \rangle.$$

Usando el teorema de Ehrenfest y la definición de la función de Green menor

$$(1.49) \quad J_\alpha = \frac{1}{i} \langle [H_\alpha; H] \rangle = \langle \dot{x}_\alpha H_{C\alpha} x_C \rangle = \frac{1}{i} \frac{d}{dt'} \text{Tr} (H_{C\alpha} G_{\alpha C}^<(t, t'))|_{t'=t}.$$

De la ecuación 1.30 se obtiene la ecuación de Dyson para el componente $G_{\alpha C}^<$,

$$(1.50) \quad G_{\alpha C}^< = g_\alpha^r H_{\alpha C} G_C^<,$$

reemplazando

$$(1.51) \quad J_\alpha = 2\text{Re} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega (G_C^<(\omega) \Sigma_\alpha^a(\omega) + G_C^r(\omega) \Sigma_\alpha^<(\omega)) \right\}.$$

A partir de la relación de la ecuación 1.20 se puede demostrar que

$$(1.52) \quad \Sigma_\alpha^<(\omega) = iB_\alpha(\omega)\Gamma_\alpha(\omega),$$

con $\Gamma_\alpha(\omega)$

$$(1.53) \quad \Gamma_\alpha(\omega) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2\pi(k_\alpha/m_\alpha)}{N_\alpha + 1} \sum_{n=0}^{N_\alpha} \sin^2(q_n^\alpha) \frac{1}{E_{\alpha n}} [\delta(\omega - E_{\alpha n}) - \delta(\omega + E_{\alpha n})].$$

En el paso al límite $\sum_n \rightarrow \int dn$ y haciendo un cambio de variables a q en lugar de n se obtiene

$$(1.54) \quad \Gamma_\alpha(\omega) = \text{sgn}(\omega) \frac{2k_\alpha}{m_\alpha} \Theta \left(1 - \left(1 - \frac{\omega^2}{2\omega_\alpha} \right)^2 \right) \sqrt{1 - \left(1 - \frac{\omega^2}{2\omega_\alpha} \right)^2}.$$

Explicitando la parte real de la ecuación 1.51 y tomando la traza se obtiene

$$(1.55) \quad J_\alpha = \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega (G_{l_\alpha, l_\alpha}^<(\omega) (\Sigma_\alpha^r - \Sigma_\alpha^a) + (G_{l_\alpha, l_\alpha}^r - G_{l_\alpha, l_\alpha}^a) \Sigma_\alpha^<).$$

Utilizando los resultados del teorema de Langreth para $G^<$ (ecuación 1.40) y la ecuación 1.52 se llega

$$(1.56) \quad J_\alpha = \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \mathcal{T}(\omega) (B_\alpha(\omega) - B_\beta(\omega)),$$

con $\mathcal{T}(\omega) = |G_{l_\alpha, l_\beta}^r(\omega)|^2 \Gamma_\beta(\omega) \Gamma_\alpha(\omega)$ el coeficiente de transmisión. Está asociado al transporte térmico. Es una probabilidad de transmisión de la energía ω a través de la estructura. Observar también que $\mathcal{T}(\omega)$ es independiente de la temperatura y toda la dependencia en la temperatura está en las distribuciones $B_L(T_L, \omega)$ y $B_R(T_R, \omega)$ con T_L, T_R la temperatura del reservorio izquierdo y derecho respectivamente.

ANÁLISIS TERMODINÁMICO DEL PROBLEMA DEPENDIENTE DEL TIEMPO

En este capítulo se trata el mismo problema que en la sección 1.3, con el ingrediente adicional de un potencial dependiente del tiempo actuando sobre alguna partícula de la parte central y se tratará desde un enfoque termodinámico. Este capítulo está dividido de la siguiente manera: en la sección 2.1 se analiza la producción de calor, trabajo y energía del sistema. Luego en la sección 2.2 se analiza la cinética de los términos, es decir, la variación respecto al tiempo de estas cantidades. También en esta sección se presenta la expansión adiabática. En la última sección de este capítulo, sección 2.3, se define la eficiencia de este sistema cuando opera como máquina o bomba térmica. En las referencias [1–4, 12] se llevó a cabo un análisis similar para sistemas de electrones. La diferencia es que en los fonones no se conserva el número de partículas y no se realiza trabajo eléctrico.

2.1 Análisis termodinámico

El objetivo de esta sección es poder identificar calor y trabajo y expresar la primera y segunda ley de la termodinámica en procesos que se aparten poco del equilibrio debido a pequeñas variaciones de los parámetros dependientes del tiempo que aparecen en el Hamiltoniano. El modelo es igual al estudiado en la sección 1.3 con el ingrediente extra de potenciales dependientes del tiempo como se muestra en la figura 2.1. El Hamiltoniano que describe este sistema es

$$(2.1) \quad H = \sum_{\alpha} (H_{c_{\alpha}} + H_{\alpha}) + H_c + V(t),$$

donde H_α , H_{c_α} y H_c ya fueron presentados en la sección anterior y $V(t)$ es un potencial dependiente del tiempo

$$(2.2) \quad V(t) = \sum_j \frac{k_j}{2} (t) x_j^2,$$

La perturbación actuará en uno o más sitios de la red. Los siguientes razonamientos no dependen de la forma particular del potencial. La única hipótesis que se hace sobre el potencial es que es periódico $V(t + \tau) = V(t)$.

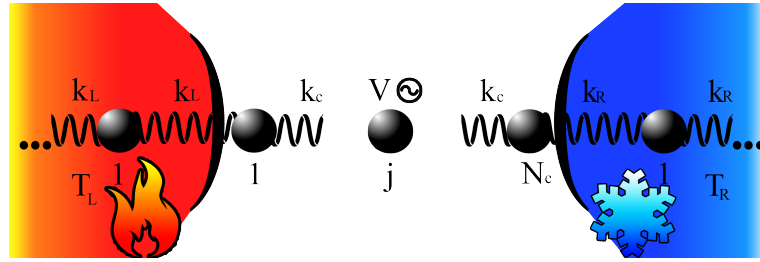


FIGURA 2.1. Diagrama del sistema bajo consideración- Además de la diferencia de temperatura, una perturbación periódica actúa en uno o más sitios de la red del sistema central.

Como ya se menciona en 1.1, una descripción en equilibrio se realiza con la función de partición en el ensamble estadístico representado por el operador densidad ρ . La entropía de von Neumann correspondiente es

$$(2.3) \quad S = -\text{Tr}[\rho \ln \rho].$$

Las variaciones de la entropía pueden generarse por cambios explícitos en H es decir $\delta H = (\partial H / \partial V) \delta V$ y este cambia porque cambia V en el tiempo. Como consecuencia ρ tiene un cambio cuantificado $\delta \rho = \rho(t + \delta t) - \rho(t)$ y el cambio en la entropía resulta

$$(2.4) \quad \delta S = \frac{1}{T} \text{Tr}[\delta \rho H] - \frac{1}{T} F \delta V,$$

donde se define la fuerza generalizada como

$$(2.5) \quad F = -\text{Tr} \left[\rho \frac{\partial H}{\partial V} \right],$$

y se uso el hecho que $\text{Tr}[\delta \rho] = 0$ por estar normalizada la distribución de probabilidad. De la ecuación 2.4 se identifica el término

$$(2.6) \quad \delta U = \text{Tr}[\delta \rho H] = \sum_\alpha [\delta U_\alpha + \delta U_{c_\alpha}] + \delta U_c,$$

con la variación de la energía interna almacenada en todo el sistema, tanto la parte central como en los reservorios y el contacto. Cada contribución se identifica como $\delta U_v = \text{Tr} \delta \rho H_v$ con $v = c_\alpha, \alpha, c$.

El segundo término de 2.4 es el trabajo hecho por las fuerzas dependientes del tiempo

$$(2.7) \quad \delta W = F \delta V.$$

Dicho esto, la primera ley se lee como

$$(2.8) \quad T \delta S = \sum_{\alpha=L,R} [\delta U_{\alpha} + \delta U_{C\alpha}] + \delta U_C - \delta W = \delta Q_{\text{tot}}.$$

Si sólo hay cambios en los parámetros δV la variación de la energía interna total es nula y todo el trabajo realizado por las fuentes externas se transforma en calor y se reabsorbe en el sistema, es decir $\delta Q = -\delta W$

Se distingue entre calor reversible y disipativo

$$(2.9) \quad \delta Q^{\text{tot}} = \delta Q^{\text{rev}} + \delta Q^{\text{dis}},$$

y entropía reversible y disipativa

$$(2.10) \quad \delta S^{\text{rev/dis}} = -\frac{\delta W^{\text{cons/dis}}}{T} = \frac{\delta Q^{\text{rev/dis}}}{T}.$$

La diferencia entre reversible y disipativo es que el primero al ser promediado en un ciclo da un valor medio nulo mientras que el segundo no. Los procesos reversibles se hacen mediante una secuencia de estados de equilibrio con una densidad ρ calculada a cada instante con el $H(t)$ congelado a tiempo t .

2.2 Análisis cinético, definición de flujos de calor y trabajo

El objetivo de esta sección es determinar el ritmo al que cambia el flujo de energía en cada parte del sistema. Así mismo, se definirán la potencia desarrollada para potenciales alternos y la correspondiente producción de calor y entropía. Las ecuaciones son exactas y válidas para cualquier amplitud y frecuencia del potencial, acople entre el sistema y los reservorios y modelo del hamiltoniano.

Para analizar la dinámica del intercambio de energía entre las diferentes partes del sistema es conveniente definir los siguientes flujos de energía [4, 12]

$$(2.11) \quad \dot{E}_v(t) = i \langle [H, H_v] \rangle,$$

con $v = \alpha, c\alpha, C$, es decir, las variaciones de energía correspondientes a los reservorios, contacto y parte central respetivamente. La fuerza generalizada se define como

$$(2.12) \quad F = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial V} \right\rangle.$$

Desarrollando los conmutadores se obtiene

$$(2.13) \quad \dot{E}_\alpha = \langle \dot{H}_\alpha \rangle$$

$$(2.14) \quad \dot{E}_{c\alpha} = -\dot{E}_\alpha + i \langle [H_c, H_{c\alpha}] \rangle + i \sum_\beta \langle [H_{c\beta}, H_{c\alpha}] \rangle$$

$$(2.15) \quad \dot{E}_c = \langle \dot{H}_C \rangle + F\dot{V},$$

donde el último término corresponde a la potencia desarrollada por las fuerzas alternas. Teniendo en cuenta que variación de la energía total almacenada en todo el sistema debe ser igual a la potencia que desarrollan todas las fuerzas alternas, $\langle \dot{H} \rangle = -P(t) = -F\dot{V}$, se puede obtener la ley de conservación para la variación de la energía interna

$$(2.16) \quad \sum_\alpha [\dot{E}_\alpha + \dot{E}_{c\alpha}] + \dot{E}_c = 0.$$

Cuando se considera el promedio temporal de las cantidades durante un período, definido como

$$\bar{A} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau A dt,$$

se obtiene que

$$\langle \bar{\dot{H}}_{c\alpha} \rangle = 0,$$

mientras que

$$\sum_\alpha \bar{\dot{E}}_\alpha = -\bar{P}.$$

Esto se entiende del hecho que la energía puede ser almacenada o extraída a un ritmo neto sólo en los reservorios, es decir, no hay acumulación de energía en la parte central ni en los contactos.

2.2.1 Expansión adiabática

Para poder obtener resultados cuantitativos en situaciones no demasiado alejadas del equilibrio termodinámico se considerará el régimen adiabático. Este corresponde a períodos de los potenciales alternos mucho mayores que cualquier tiempo característico de los fonones en el sistema central. En términos de la frecuencia del forzado, esto significa $\Omega < T < \omega_v$, ($\hbar = k_B = 1$). A continuación se resume esquemáticamente la teoría presentada en la referencia [3]. En este régimen el potencial dependiente del tiempo varía muy lentamente, de manera que el operador evolución temporal se puede desarrollar en potencias de \dot{V} :

$$(2.17) \quad \hat{U}(t, t_0) \simeq \text{T exp} \left[-iH_t(t - t_0) - i \int_{t_0}^t dt'(t - t')F\dot{V}(t) \right].$$

Correspondientemente la evolución temporal de un observable A es:

$$(2.18) \quad A(t) = \langle A \rangle - i \int_{t_0}^t dt'(t - t') \langle [A(t), F(t')] \rangle \dot{V}(t) = \langle A \rangle_t + L\dot{V}.$$

Acá los operadores $A(t)$ y $F(t)$ están definidos en la representación de Heisenberg respecto al Hamiltoniano congelado, H_t , a tiempo t , lo cual corresponde a considerar a t como un parámetro. Los valores medios $\langle \dots \rangle_t$ se hacen respecto a la densidad ρ_t definida a partir del Hamiltoniano H_t . Expandiendo a primer orden en δT y en \dot{V} el flujo de calor y la fuerza, se obtiene:

$$(2.19) \quad \begin{pmatrix} J(t) \\ F(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_t \\ F_t \end{pmatrix} + \mathbf{L} \begin{pmatrix} \delta T \\ \dot{V} \end{pmatrix},$$

donde \mathbf{L} es una matriz de Onsager que depende de funciones respuesta.

El primer sumando del lado derecho de 2.19 corresponde a los términos con valor medio temporal nulo. Los componentes diagonales describen, la conductividad térmica, $\mathbb{L}_{1,1}$, y la potencia generada debido a la frecuencia del potencial, $\mathbb{L}_{2,2}$. Los términos no diagonales describen la generación de calor debido a potenciales dependientes del tiempo, $\mathbb{L}_{1,2}$, y la generación de fuerzas no conservativas en respuesta a un gradiente de temperatura $\mathbb{L}_{2,1}$. Se puede demostrar que debido a la reversibilidad microscópica se satisface $\mathbb{L}_{1,2} = -\mathbb{L}_{2,1}$ (relaciones de Onsager). Promediando sobre un período del potencial alterno, la disipación neta de calor ocurre en los reservorios y se tiene

$$(2.20) \quad \bar{S} = \frac{\bar{Q}_L}{T_L} + \frac{\bar{Q}_R}{T_R},$$

donde la variación media temporal del calor en el reservorio es

$$(2.21) \quad \bar{Q}_\alpha = \bar{E}_\alpha,$$

donde se toma el calor positivo cuando entra al reservorio y negativo cuando sale. También se satisface

$$(2.22) \quad \bar{E}_L + \bar{E}_R = \bar{W} = -\bar{P},$$

con \bar{P} la potencia y W el trabajo realizado por los potenciales alternos

$$(2.23) \quad \bar{W} = -\sum_j \overline{F_j \dot{V}_j(t)},$$

donde el trabajo es positivo si se realiza sobre el sistema y negativo si se le extrae trabajo al sistema. De esta forma la producción de entropía es

$$(2.24) \quad \bar{S} = \bar{Q}_R \frac{\delta T}{T^2} - \sum_j \overline{F_j(t) \frac{\dot{V}_j(t)}{T}},$$

a primer orden en \dot{V} y $\delta T = T_L - T_R$.

Se define el flujo de calor $J_1 = \bar{Q}_R$, su correspondiente afinidad $X_1 = \delta T/T^2$. La ecuación 2.24 en principio podría sugerir considerar a $-F_j$ como el flujo y \dot{V}/T como la afinidad asociada. Sin

embargo, la ecuación es válida después de promediar en el tiempo. Antes, hay términos adicionales que están relacionados con las fuerzas conservativas. Lo que resulta más conveniente es definir a la afinidad $X_2 = \Omega/T$ y el flujo asociado $J_2 = \bar{W}/\Omega$ ya que los términos \dot{V} son proporcionales a Ω [13]. De esta forma la ecuación 2.24 se lee como

$$(2.25) \quad \bar{S} = \sum_i J_i X_i = L_{1,1} X_1^2 + L_{2,2} X_2^2,$$

con

$$(2.26) \quad J_n = \sum_k L_{n,k} X_k.$$

Se puede notar que la segunda ley de la termodinámica implica que $L_{1,1} > 0$ y $L_{2,2} > 0$ para poder garantizar $\bar{S} > 0$.

2.3 Eficiencia de máquinas y bombas térmicas

En esta última sección se define la eficiencia de las máquinas y bombas térmicas y bajo que condiciones se puede maximizar. En el caso de una máquina térmica, la corriente de calor fluye del reservorio caliente al frío y se le puede extraer trabajo realizado en contra de las fuerzas externas, es decir $L_{1,2} X_2 < 0$. En el caso de una bomba, las fuerzas externas deben realizar trabajo para que la corriente de calor fluya del reservorio frío al caliente, es decir $L_{1,2} X_2 > 0$. En el caso de una máquina una forma apropiada de medir la eficiencia es tomar el cociente entre la potencia neta extraída, $\bar{P} = -\bar{W}$ y el calor que sale del reservorio a mayor temperatura $-\bar{Q}$. En el caso de una bomba, las fuerzas externas realizan trabajo para poder extraer calor del foco frío. Entonces la eficiencia de una bomba se define como la inversa de la del máquina. Suponiendo $T_L > T_R$ y $T_L = T_R + \delta T$, la eficiencia de una máquina y una bomba térmicas vienen dadas por

$$(2.27) \quad \eta^{\text{mot}} = \frac{1}{\eta^{\text{bom}}} = \frac{\bar{W}}{\bar{Q}_L}.$$

Por otra parte

$$(2.28) \quad \bar{P} = -\bar{W} = -J_3 X_3 T ; \quad \bar{Q}_L = \bar{E}_L ; \quad \bar{W} = \bar{E}_L + \bar{E}_R,$$

$$(2.29) \quad \bar{S} = \frac{\bar{Q}_L}{T_L} + \frac{\bar{Q}_R}{T_R} = \frac{\bar{Q}_L(T_L - \delta T) + (\bar{W} - \bar{Q}_L)T_L}{T_L(T_L - \delta T)},$$

Reemplazando en la definición de eficiencia 2.27 se obtiene

$$(2.30) \quad \eta^{\text{mot}} = \frac{1}{\eta^{\text{bom}}} = \frac{T_L - T_R}{T_L} + \frac{T_R \bar{S}}{\bar{Q}_L}.$$

Para máquinas térmicas la corriente de calor fluye del reservorio de mayor temperatura al de menor temperatura $\bar{Q}_L > 0$ mientras que para bombas la situación es al revés, \bar{Q}_L . Teniendo

ademas en cuenta que $\bar{S} \geq 0$, la ecuación 2.30 muestra que la eficiencia está acotada por la de Carnot correspondiente a máquina térmica o bomba según el caso.

Las eficiencias en términos de las afinidades y corrientes se escriben como

$$(2.31) \quad \eta^{\text{mot}} = \frac{1}{\eta^{\text{bom}}} = -\frac{J_2 X_2}{J_1 X_1}.$$

Analizo primero el caso de un motor. En término de los coeficientes $L_{i,j}$, η se escribe como

$$(2.32) \quad \eta^{\text{mot}} = -\frac{X_2(-L_{1,2}X_1 + L_{2,2}X_2)}{X_1(L_{1,1}X_1 + L_{1,2}X_2)}.$$

Esta relación se puede maximizar con respecto a uno de los parámetros dejando el otro fijo. Extremizando con respecto a X_1

$$(2.33) \quad \frac{\partial \eta}{\partial X_1} = -\frac{X_2[-L_{1,1}L_{2,2}X_2^2 + L_{1,1}X_1(L_{1,2}X_1 - 2L_{2,2}X_2)]}{X_1^2(L_{1,1}X_1 + L_{1,2}X_2)^2} = 0$$

Se encuentran dos soluciones

$$(2.34) \quad X_{1\pm} = \frac{L_{1,1}L_{2,2} \pm \sqrt{L_{1,1}L_{2,2}\det L}}{L_{1,1}L_{1,2}}X_2,$$

con $\det L = L_{1,1}L_{2,2} + L_{1,2}^2$. La solución que tiene sentido físico para este problema es X_{1+} Si $X_1 = X_{1+}$ entonces

$$(2.35) \quad \eta_+ = 1 - \frac{-2L_{1,1}L_{2,2} + 2\sqrt{L_{1,1}L_{2,2}\det L}}{L_{1,2}^2}.$$

De manera análoga se hace para el caso de una bomba y se obtiene que la solución que tiene sentido físico es $X_1 = X_{1-}$ y se obtiene

$$(2.36) \quad \eta_- = 1 + \frac{2L_{1,1}L_{2,2} + 2\sqrt{L_{1,1}L_{2,2}\det L}}{L_{1,2}^2}.$$

Equivalentemente las expresiones se pueden escribir como

$$(2.37) \quad \eta_{\text{máx}} = \eta_{CR} \frac{\sqrt{1+\zeta} - 1}{\sqrt{1+\zeta} + 1},$$

donde $\zeta = \frac{L_{1,2}^2}{L_{1,1}L_{2,2}}$ es denominada « figura de mérito » y η_{CR} es la eficiencia de Carnot; $\eta_{CR} = (T_L - T_R)/T_L$ para motores y $\eta_{CR} = T_L/(T_L - T_R)$ para bombas. Se ve entonces que la eficiencia máxima a la que se puede operar el dispositivo manteniendo fija la frecuencia del forzado o bien la diferencia de temperatura, es la de Carnot. El mecanismo de operación óptimo se consigue cuando la figura de mérito tiende a infinito. Por lo tanto la estrategia para aumentar eficiencia es maximizar el coeficiente $L_{1,2}$ y minimizar $L_{1,1}$ y $L_{2,2}$. Esto puede conseguirse con un diseño adecuado de la parte central y de las fuerzas aplicadas. En el siguiente capítulo se analiza un caso sencillo el que se aplican a la parte central varios potenciales alternos con desfases.

RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA: MODELOS Y RESULTADOS

*An expert is a person who has
made all the mistakes that can be
made in a very narrow field*

Niels Bohr

Utilizando las técnicas estudiadas en los capítulos anteriores, en la sección 3.1 se muestra como expresar los flujos de energía, trabajo y eficiencias en términos de las funciones de Green en nanoestructuras de fonones acopladas a reservorios a diferentes temperaturas y operadas por potenciales periódicos en el tiempo [11, 14–17]. Restringiendo el análisis al régimen adiabático y respuesta lineal respecto a la diferencia de temperaturas, se calculan los coeficientes de Onsager $L_{i,j}$, la correspondiente figura de mérito y la eficiencia siguiendo el marco teórico presentado en el capítulo 2. Luego, en la sección 3.2 se discuten diversas configuraciones se muestran los resultados. Las conclusiones de este trabajo se presentan en la sección 3.3.

3.1 Planteo del problema con el formalismo las funciones de Green

En esta sección se va a calcular y obtener expresiones para la corriente de ambos reservorios, y potencia desarrollada por las fuerzas alternas. Esto va a permitir obtener los coeficientes $L_{i,j}$ para luego obtener la figura de mérito y la eficiencia del sistema. El rendimiento de las máquinas térmicas cuánticas, en general suele evaluarse mediante la caracterización de un solo ciclo, como en termodinámica clásica. Se analizará el régimen estacionario alterno, en el que el promedio temporal de un sólo ciclo de la eficiencia y la potencia se mantiene por un número arbitrario de ciclos, es decir el trabajo realizado en n ciclos es igual a n veces el trabajo hecho en un ciclo.

La primera cantidad a calcular es la corriente \dot{E}_ν con $\nu = \alpha, c\alpha$.

$$(3.1) \quad \dot{E}_\alpha = \langle \dot{H}_\alpha \rangle = \frac{1}{i} \left\langle \left[\frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha}, k_\alpha x_c x_\alpha \right] \right\rangle = 2\text{Re} \frac{d}{dt'} [iH_{c\alpha} G_{c\alpha}^<(t, t')] |_{t'=t},$$

con $H_{c\alpha}$ el coeficiente que acopla a el reservorio con la parte central. El siguiente paso es aplicar el teorema de Langreth

$$(3.2) \quad \dot{E}_\alpha = 2\text{Re} \frac{d}{dt'} \left\{ i \int dt'' G_c^r(t, t-t'') \Sigma_\alpha^<(t''-t') + G_c^<(t, t-t'') \Sigma_\alpha^a(t''-t') \right\} |_{t'=t}.$$

Analizo el primer sumando de 3.2. Para esto, transformo en Fourier

$$(3.3) \quad \text{Re} \frac{d}{dt'} i \left\{ \int dt'' \frac{d\omega_1}{2\pi} e^{-i\omega_1(t-t'')} G^r(t, \omega) \frac{d\omega_2}{2\pi} e^{-i\omega_2(t''-t')} iB_\alpha(\omega_2) \Gamma_\alpha(\omega_2) \right\},$$

donde $B_\alpha(\omega)$ es la distribución de Bose a temperatura del reservorio α , ω_α es la frecuencia característica del reservorio y $\Gamma_\alpha(\omega)$ fue definida en la ecuación 1.54.

La integral $\int dt''$ da $\delta(\omega_2 - \omega_1)$. Derivando se obtiene

$$(3.4) \quad -\text{Re} \int \frac{d\omega}{2\pi} i\omega G^r(t, \omega) B_\alpha(\omega) \Gamma_\alpha(\omega).$$

Debido a que los coeficientes $G(t, \omega)$, tienen una dependencia periódica en el tiempo, admiten desarrollo en serie

$$(3.5) \quad G^r(t, \omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{G}(n, \omega) e^{-in\Omega t}.$$

A este desarrollo se lo conoce con el nombre de *desarrollo de Floquet*. Los diferentes componentes obedecen la siguiente identidad [11]

$$(3.6) \quad \mathcal{G}_{l,l'}(n, \omega) - \mathcal{G}_{l,l'}^\dagger(-n, \omega) = -i \sum_{n', \beta=L,R} \mathcal{G}_{l,\beta}(n+n', \omega-n') \Gamma_\beta(\omega-n') \mathcal{G}_{\beta,l'}^\dagger(n', \omega-n'),$$

donde se usó la notación $\omega_\lambda = \omega + \lambda\Omega$. Esta identidad recibe el nombre de identidad espectral. Retomando las cuentas, aplicando el desarrollo de Floquet a 3.4 y usando el hecho que $\text{Re}(z) = \text{Re}(z + z^*)/2$ se obtiene

$$(3.7) \quad -\frac{1}{2} \text{Re} \left[\sum_n \int \frac{d\omega}{2\pi} i\omega B_\alpha(\omega) \Gamma_\alpha(\omega) e^{-in\Omega t} \left[\mathcal{G}_{l_\alpha l_\alpha}(n, \omega) - \mathcal{G}_{l_\alpha l_\alpha}^\dagger(-n, \omega) \right] \right].$$

Analizo el segundo sumando de 3.2. Transformo en Fourier + Floquet

$$(3.8) \quad \begin{aligned} & \frac{d}{dt'} \text{Rei} \left\{ \int dt'' G^<(t, t-t'') \Sigma_\alpha^a(t''-t') \right\} = \\ & -2\text{Re} \int dt'' G^<(t, t'') \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(\omega') \omega'}{\omega - \omega' - i0^+} = \end{aligned}$$

$$(3.9) \quad -2\text{Re} \sum_{n,n',\beta} e^{-in\Omega t} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\omega'}{2\pi} \mathcal{G}(n+n',\omega) iB_\beta(\omega) \Gamma_\beta(\omega) \mathcal{G}^\dagger(n',\omega) \frac{\Gamma_\alpha(\omega')\omega'}{\omega-\omega'-i0^+}.$$

Este término se reescribe como

$$(3.10) \quad \begin{aligned} & i \sum_n e^{-in\Omega t} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\omega'}{2\pi} \left\{ \mathcal{G}(n+n',\omega_{-n'}) \Gamma_\beta(\omega_{-n'}) \mathcal{G}^\dagger(n',\omega_{-n'}) \frac{\Gamma_\alpha(\omega')}{\omega-\omega'-i0^+} \right. \\ & \left. - \mathcal{G}^\dagger(-n+n',\omega_{-n'}) \Gamma_\beta(\omega_{-n'}) \mathcal{G}(n',\omega_{-n'}) \frac{\Gamma_\alpha(\omega')}{\omega-\omega'+i0^+} \right\} \omega' B_\beta(\omega_{-n'}) \\ & = i \sum_{n,\beta} e^{-in\Omega t} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{G}(n+n',\omega_{-n'}) \Gamma_\beta(\omega_{-n'}) \mathcal{G}^\dagger(n',\omega_{-n'}) B_\beta(\omega_{-n'}) \\ & \times \int \frac{d\omega'}{2\pi} \left\{ \frac{\Gamma_\alpha(\omega')\omega'}{\omega-\omega'-i0^+} - \frac{\Gamma_\alpha(\omega'+n\Omega)(\omega'+n\Omega)}{\omega-\omega'+i0^+} \right\}, \end{aligned}$$

donde se hizo el cambio de variables $-n+n' \rightarrow n$ y $\omega \rightarrow \omega+n\Omega$.

Para obtener el valor medio se integra en el tiempo. La integral $\int dt \dots$ da $\delta(n)$. El componente que contribuye es

$$(3.11) \quad \sum_{n,n',\beta} \int dt e^{-in\Omega t} \mathcal{G}(n+n',\omega_{-n'}) \Gamma_\beta(\omega_{-n'}) \mathcal{G}^\dagger(-n',\omega_{-n'}) \times \left\{ [\Gamma_\alpha(\omega_{-n})\omega_{-n} + \Gamma_\alpha(\omega)\omega] B_\beta(\omega_{-n'}) \frac{1}{2} - \omega \Gamma_\alpha(\omega) B_\alpha(\omega) \right\},$$

y reemplazando $n=0$ se obtiene

$$(3.12) \quad \sum_{n',\beta} \mathcal{G}(n',\omega) \Gamma_\beta(\omega) \mathcal{G}^\dagger(-n',\omega) \Gamma_\alpha(\omega_{n'}) \omega_{n'} [B_\beta(\omega) - B_\alpha(\omega_{n'})].$$

Dado que se va a analizar la contribución lineal en la diferencia de temperaturas δT y en la frecuencia del forzado, se realizan las siguientes aproximaciones $\Gamma_\alpha(\omega_n) \sim \Gamma_\alpha(\omega) + n\Omega \frac{d}{d\omega} \Gamma_\alpha(\omega)$,

$$B_\alpha(\omega_n) \sim B(\omega) + \partial_\omega B(\omega) n\Omega.$$

La diferencia de funciones de Bose se aproxima por

$$(3.13) \quad \frac{\partial B}{\partial T} \Delta T - \frac{\partial B}{\partial \omega} n' \Omega$$

Luego utilizando que

$$(3.14) \quad \partial_T B(\omega) = \left(-\frac{\omega}{T} \right) \partial_\omega B(\omega),$$

la ecuación 3.12 se reescribe como

$$(3.15) \quad \begin{aligned} \bar{\dot{E}}_\alpha &= \sum_{n,\beta} \text{Re} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{G}_{l_\alpha,l_\beta}(n,\omega) \Gamma_\beta(\omega) \mathcal{G}_{l_\beta,l_\alpha}^\dagger(-n,\omega) \\ & \partial_\omega B_\alpha(\omega) \left(-\frac{\omega}{T} \Delta T - n\Omega \right) \left[\Gamma_\alpha(\omega)(\omega+n\Omega) + \frac{d}{d\omega} \Gamma_\alpha(\omega)(\omega+n\Omega) n\Omega \right]. \end{aligned}$$

Por último reconstruyo las funciones G a partir de su desarrollo de Floquet a primer orden en las afinidades $X_1 = \frac{\Delta T}{T^2}, X_2 = \frac{n\Omega}{T}$,

$$\begin{aligned}
 & \sum_{n,\beta} \operatorname{Re} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(n, \omega) \Gamma_\beta(\omega) \mathcal{G}_{l_\beta, l_\alpha}^\dagger(-n, \omega) \partial_\omega B(\omega) \left(-\frac{\omega}{T} \Delta T - n\Omega \right) \Gamma_\alpha(\omega) \omega = \\
 & \sum_{n, n', \beta} \operatorname{Re} \int dt \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(n', \omega) e^{-in'\Omega t} \Gamma_\beta(\omega) \mathcal{G}_{l_\beta, l_\alpha}^\dagger(-n, \omega) e^{in\Omega t} \partial_\omega B(\omega) \left(-\frac{\omega}{T} \Delta T - n\Omega \right) \Gamma_\alpha(\omega) \omega = \\
 (3.16) \quad & \sum_\beta \operatorname{Re} \int dt \frac{d\omega}{2\pi} G_{l_\alpha, l_\beta}^f(t, \omega) \Gamma_\beta(\omega) \left(-G_{l_\beta, l_\alpha}^{f\dagger}(t, \omega) \frac{\omega}{T} - \frac{1}{i} \partial_t G_{l_\alpha, l_\beta}^f \right) \partial_\omega B(\omega) \Gamma_\alpha(\omega) \omega.
 \end{aligned}$$

De la ecuación 3.16 se pueden identificar los coeficientes $L_{1,1}$ y $L_{1,2}$

$$\begin{aligned}
 L_{1,1} &= \int_0^\tau T \frac{dt}{\tau} \int \frac{d\omega}{2\pi} (-\omega^2) |G_{L,R}^f(t, \omega)|^2 \Gamma_L(\omega) \Gamma_R(\omega) \partial_\omega B(\omega) \\
 (3.17) \quad L_{1,2} &= \sum_\beta \operatorname{Re} \int_0^\tau T \frac{dt}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega G_{R, l_\beta}^f(t, \omega) \Gamma_{l_\beta}(\omega) \partial_t G_{l_\beta, R}^{f\dagger}(t, \omega) \Gamma_R(\omega) \partial_\omega B(\omega) \frac{1}{-i}.
 \end{aligned}$$

Finalmente la cantidad que queda por calcular es la potencia media desarrollada en el sistema.

$$(3.18) \quad P = \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial t} \operatorname{Im} G_c^<(t, t) = \frac{\partial V}{\partial t} \operatorname{Im} \sum_\beta \int \frac{d\omega}{2\pi} G^r(t, \omega) i B_\beta(\omega) \Gamma_\beta(\omega) G^{r\dagger}(t, \omega)$$

o en términos de los componentes Floquet + Fouier

$$(3.19) \quad \bar{P} = \operatorname{Im} \sum_{n, n', \beta} \int \frac{d\omega}{2\pi} n \Omega V_i(n) B_\beta(\omega) \mathcal{G}_{i, l_\beta}(n + n', \omega) \Gamma_\beta(\omega) \mathcal{G}_{l_\beta, i}^\dagger(n', \omega).$$

Álgebra mediante desarrollando a primer orden en δT y en la frecuencia del forzado Ω , se llega a

$$(3.20) \quad L_{2,1} = -L_{1,2} = \sum_\beta \operatorname{Im} \int_0^\tau T \frac{dt}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega G_{R, l_\beta}^f(t, \omega) \Gamma_{l_\beta}(\omega) \frac{\partial}{\partial t} G_{l_\beta, R}^{f\dagger}(t, \omega) \Gamma_R(\omega) \frac{\partial}{\partial \omega} B(\omega)$$

$$(3.21) \quad L_{2,2} = -\frac{T\tau}{8\pi^2} \int_0^\tau dt \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\partial B(\omega)}{\partial \omega} \operatorname{Re} \left\{ \operatorname{Tr} \left[\frac{\partial G_f(t, \omega)}{\partial t} \Gamma \frac{\partial G_f^\dagger(t, \omega)}{\partial t} \Gamma \right] \right\}.$$

Es conveniente definir coeficientes $\mathcal{T}_{i,j}$ como se hizo en la ecuación 1.56

$$\begin{aligned}
 \frac{\mathcal{T}_{1,1}(\omega)}{\tau} &= \int_0^\tau dt |G_{R,L}^f(t, \omega)|^2 \Gamma_L(\omega) \Gamma_R(\omega), \\
 \frac{\mathcal{T}_{1,2}(\omega)}{2\pi} &= \int_0^\tau dt \sum_\alpha \operatorname{Im} \left\{ G_{R, l_\alpha}^f(t, \omega) \Gamma_\alpha(\omega) \frac{\partial G_{l_\alpha, R}^{f\dagger}(t, \omega)}{\partial t} \Gamma_R(\omega) \right\}, \\
 (3.22) \quad \frac{\mathcal{T}_{2,2}(\omega)\tau}{8\pi^2} &= \int_0^\tau dt \sum_{\alpha, \beta} \operatorname{Re} \left\{ \frac{\partial G_{l_\alpha, l_\beta}^f(t, \omega)}{\partial t} \Gamma_\beta(\omega) \frac{\partial G_{l_\beta, l_\alpha}^{f\dagger}(t, \omega)}{\partial t} \Gamma_\alpha(\omega) \right\},
 \end{aligned}$$

tales que

$$\begin{aligned}
 L_{1,1} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega^2 \frac{\partial B(T, \omega)}{\partial \omega} \frac{\mathcal{T}_{1,1}(\omega)}{\tau}, \\
 L_{1,2} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega \frac{\partial B(T, \omega)}{\partial \omega} \frac{\mathcal{T}_{1,2}(\omega)}{2\pi}, \\
 L_{2,2} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\partial B(T, \omega)}{\partial \omega} \frac{\mathcal{T}_{2,2}(\omega)\tau}{8\pi^2}.
 \end{aligned}
 \tag{3.23}$$

3.2 Modelos estudiados y resultados

La primera configuración a estudiar consta de un sistema con tres sitios en la parte central con un potencial $V(t) = 0.05 \cos \Omega t$ para el sitio 1 y $V(t) = 0.05 \cos(\Omega t + \phi_1)$ para el sitio 2, con $\Omega = 0.001$, $\omega_L = \omega_R = \omega_{\text{centro}} = 1$. Se comparó esta configuración cambiando $\omega_R = 0.4$. En la 3.1 se muestra el coeficiente $\mathcal{T}_{1,1}$ que está asociado a la transmisión de calor debido a un gradiente térmico. Cuando no hay potencial externo, este coeficiente vale 1 (3.1(a), línea azul) cuando $\omega_L = \omega_R = 1$. Al encender un potencial externo y si $\omega_L = \omega_R = 1$ el coeficiente se va a mantener relativamente constante pero a medida que ω/ω_c tome valores más cercanos a cero, el coeficiente decae a cero (3.1(a), línea roja). Si ahora $\omega_L = 1$ y $\omega_R = 0.4$ su forma ya deja de ser constante pero comparte en torno al cero (3.1(a), línea amarilla).

En las figuras 3.1(b) y 3.1(c) se muestra un mapa de color del coeficiente $\mathcal{T}_{1,1}/\tau$ como función de ϕ y ω/ω_c . En 3.1(b) para $\omega_R = 1$ y en 3.1(c) para $\omega_R = 0.4$. El comportamiento para ambas situaciones ante un cambio de ϕ es semejante

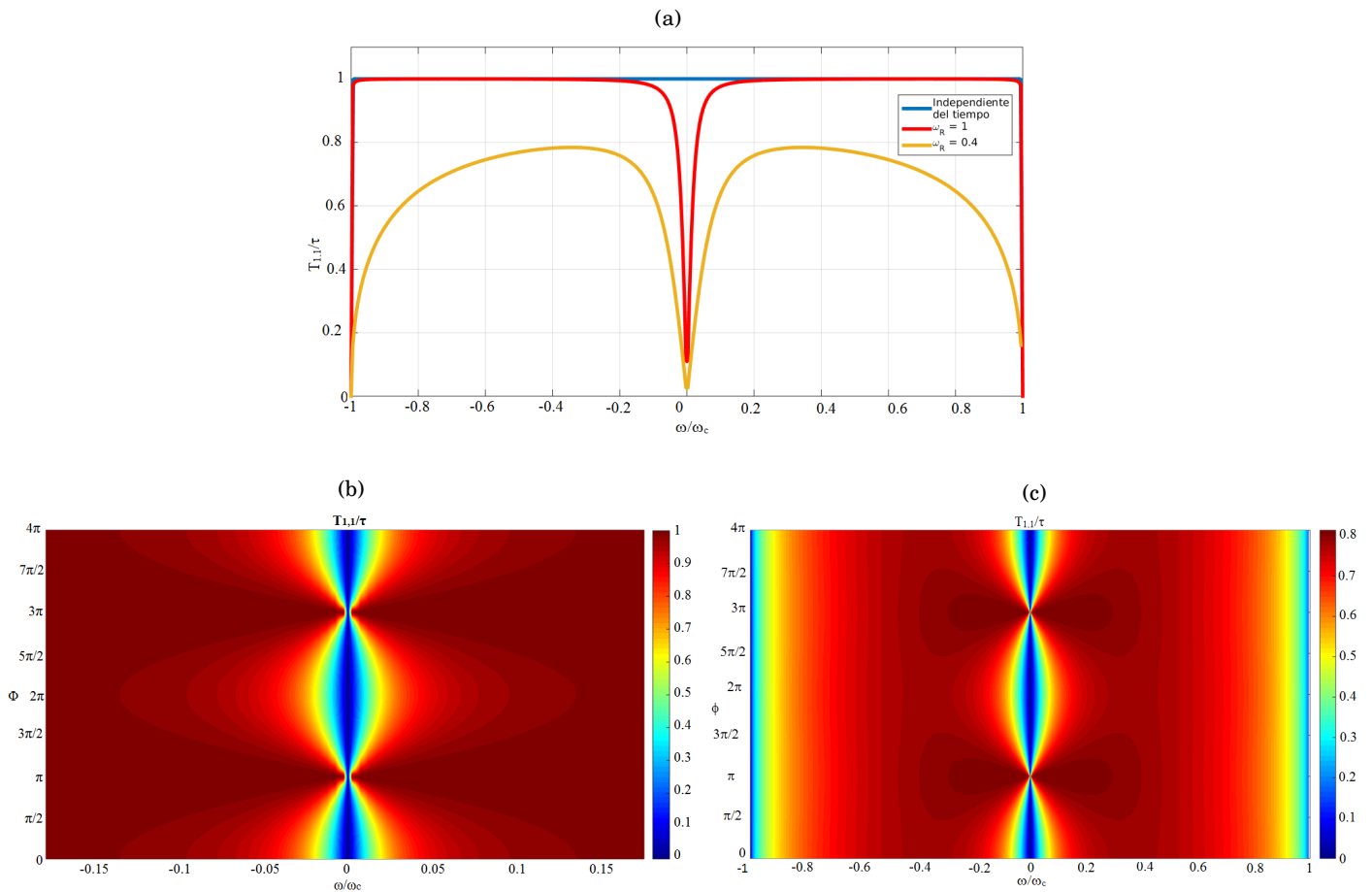


FIGURA 3.1. Coeficiente $\mathcal{T}_{1,1}/\tau$ para varias configuraciones. En 3.1(a) se muestra la configuración independiente del tiempo, en azul, en rojo con el potencial encendido con $\omega_R = 1$ y en amarillo idem pero $\omega_R = 0.4$. El efecto de encender un potencial afecta a la transmisión de calor y hace que decaiga a cero en $\omega = 0$. En 3.1(b) un mapa de color para $\mathcal{T}_{1,1}/\tau$ como función de la fase ϕ y ω/ω_c . Idem en 3.1(c) pero con $\omega_R = 0.4$.

En las figuras 3.2 se muestra al coeficiente $\mathcal{F}_{1,2}$. En 3.2(a) se muestra al coeficiente en torno a $\omega/\omega_c = 0$. En torno a cero se comporta como un polinomio de grado por lo menos 3. Este comportamiento se mantiene para todas las configuraciones estudiadas. El hecho que presente este comportamiento asegura que al multiplicarse por $\frac{\partial B}{\partial \omega}$ no haya divergencias en torno al cero y el coeficiente $L_{1,2}$ este bien definido.

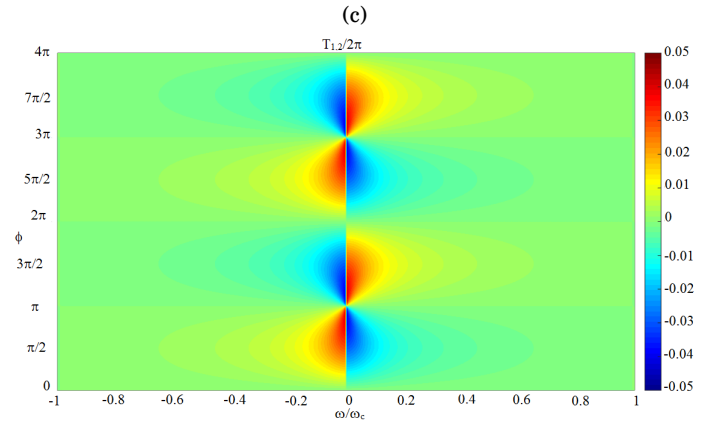
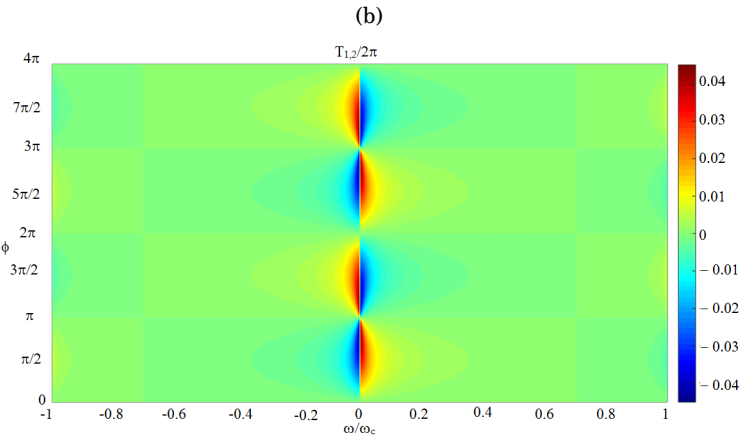
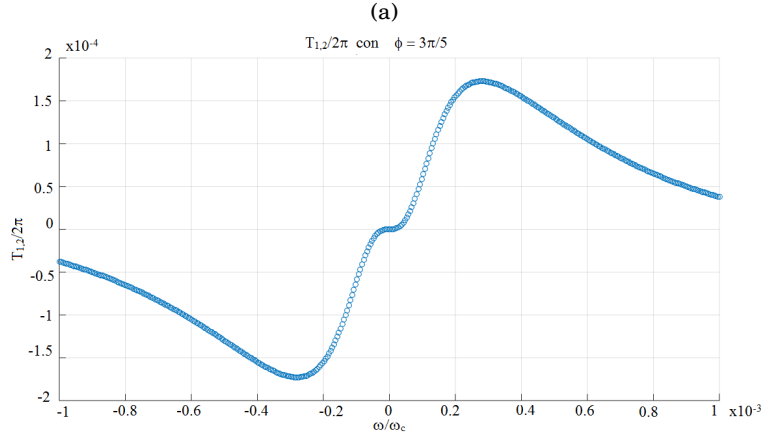


FIGURA 3.2. Coeficiente $\mathcal{F}_{1,2}/\tau$ para varias configuraciones. En 3.2(a) se muestra al coeficiente en el entorno de $\omega/\omega_c = 0$ para $\omega_R = 1$ y $\phi = 3\pi/5$. En la figura 3.2(b) se muestra un mapa de color como función de ϕ y ω/ω_c . En la figura 3.2(c) se muestra el mapa de color con $\omega_R = 0.4$

Las figuras 3.2(b) y 3.2(c) muestran el mapa de color para $\omega_L = 1$ y $\omega_R = 0.4$ respectivamente. El efecto que tiene cambiar ω_R es cambiar la forma de los lóbulos.

En las figura 3.3 se muestra al coeficiente $\mathcal{T}_{2,2}$. En 3.3(a) se muestra al coeficiente en torno a $\omega/\omega_c = 0$. En torno a cero se comporta como un polinomio de grado par. Este comportamiento se mantiene para todas las configuraciones estudiadas. Este comportamiento, al igual que para el coeficiente $\mathcal{T}_{1,2}$, asegura que al multiplicarse por $\frac{\partial B}{\partial \omega}$ no presente divergencias.

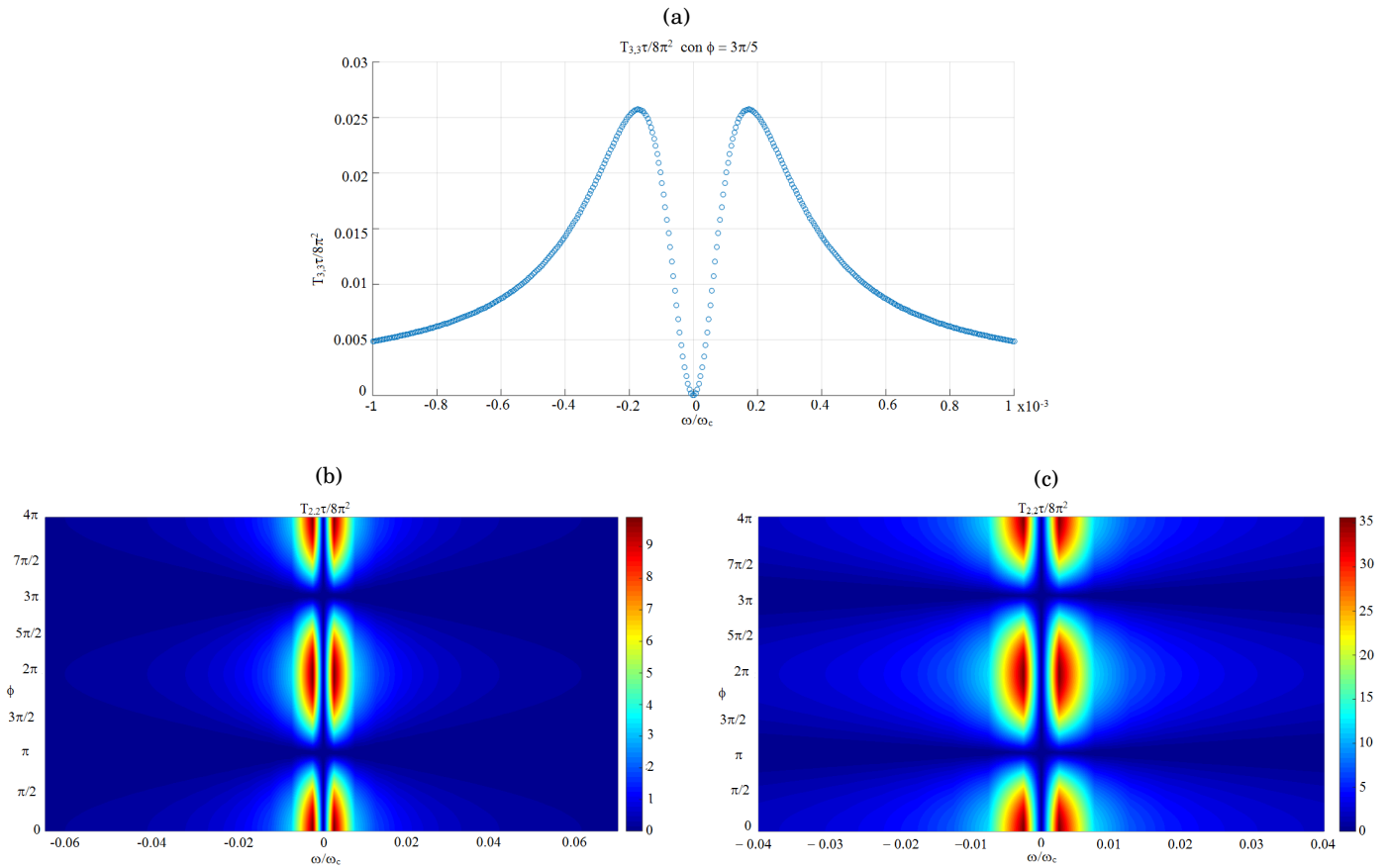


FIGURA 3.3. Coeficiente $\mathcal{T}_{1,2}/\tau$ para varias configuraciones. En 3.3(a) se muestra al coeficiente en el entorno de $\omega/\omega_c = 0$ para $\omega_R = 1$ y $\phi = 3\pi/5$. En la figura 3.3(b) se muestra un mapa de color como función de ϕ y ω/ω_c . En la figura 3.3(c) se muestra el mapa de color con $\omega_R = 0.4$

En este caso el hecho de cambiar ω_R hace que la altura de los máximos cambie y los hace más angostos.

Calculados estos coeficientes se paso a calcular los coeficientes $L_{1,1}$, $L_{1,2}$ y $L_{2,2}$ para ambas situaciones como se muestran en las figuras 3.4. A izquierda se muestran los que corresponden a $\omega_R = 1$ y a derecha $\omega_R = 0.4$.

El efecto de disminuir a ω_R hace disminuir los máximos en un orden de magnitud para $L_{1,1}$ y $L_{1,2}$ pero para $L_{2,2}$ lo aumenta. De las figuras 3.4(c) y 3.4(d) se puede anticipar el régimen donde el sistema va a trabajar como máquina o como bomba térmica. Según lo expuesto en 2.3, el modo de operación viene dado por el signo que tenga $L_{1,2}$, si $L_{1,2}X_2 < 0$ se le extrae trabajo al sistema y se le entrega en caso contrario.

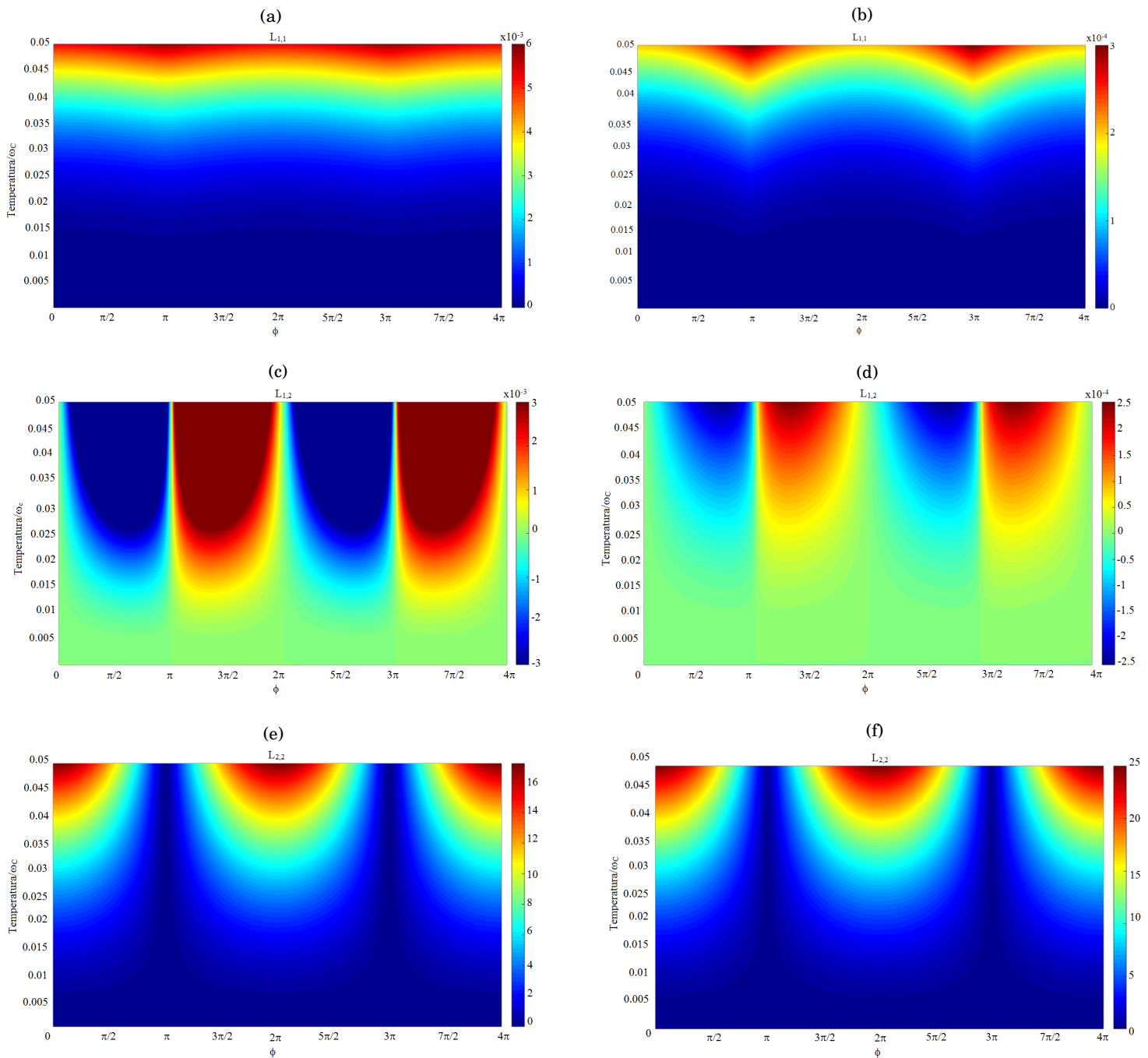


FIGURA 3.4. Coeficientes $L_{1,1}$, $L_{1,2}$ y $L_{2,2}$ como función de la fase y de la temperatura. A izquierda corresponde a $\omega_R = 1$ y a derecha $\omega_R = 0.4$. Se puede apreciar que tanto para $L_{1,1}$ y $L_{1,2}$ cambiar el parámetro ω_R hace disminuir su valor mientras que para $L_{2,2}$ aumenta. Esto se va a reflejar en la eficiencia haciendo que la configuración con $\omega_R = 0.4$ sea menor que la de $\omega_R = 1$.

En las figuras 3.5 se muestra la eficiencia para ambas configuraciones normalizadas a la eficiencia de Carnot, η_{CR} . En el intervalo entre 0 y π , para ambas configuraciones el sistema funciona como motor, pudiendose extraer trabajo mientras que en el intervalo π a 2π hay que suministrarle trabajo y el sistema funciona como bomba. También se puede observar que existe simetría en el funcionamiento como motor y bomba en cada configuración, es decir, ambas funcionan con igual eficiencia en cada modo de operación.

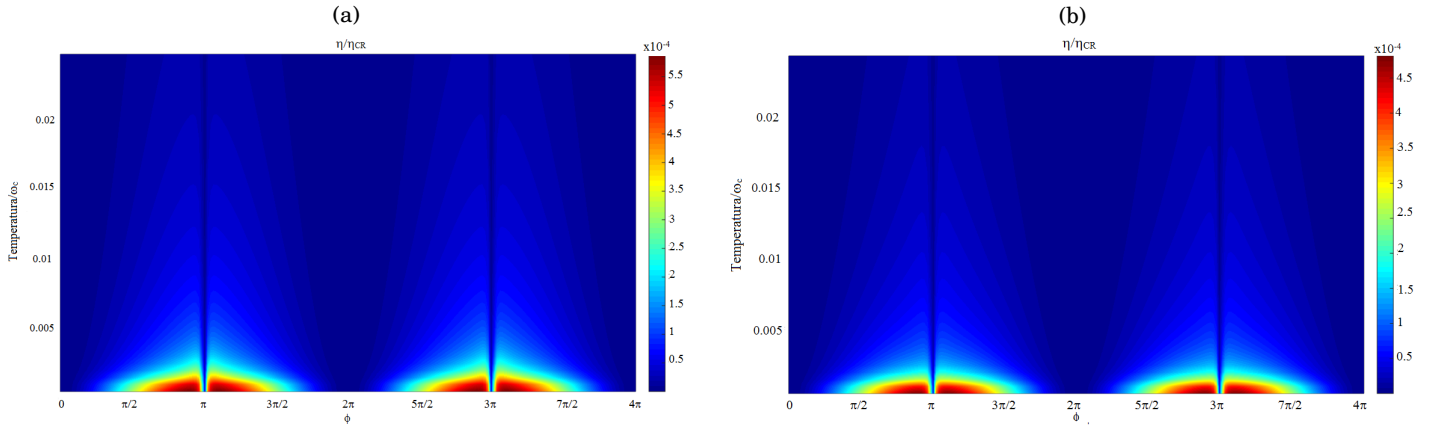


FIGURA 3.5. η/η_{CR} para ambas configuraciones. A izquierda para $\omega_R = 1$, a derecha para $\omega_R = 0.4$. Para ambas configuraciones el intervalo en el que funcionan como motor es $0 < \phi < \pi$ y como bomba $\pi < \phi < 2\pi$. Ambas resultan igual de eficientes en su funcionamiento como motor o bomba.

Si bien la eficiencia para la configuración con $\omega_R = 1$ es mayor que cuando $\omega_R = 0.4$ ambas son muy pequeñas; $5,5 \times 10^{-4}$ para la primera y $4,5 \times 10^{-4}$ para la segundo y se da en ambas a bajas temperaturas, $T/\omega_c < 2 \times 10^{-3}$.

La siguiente configuración estudiada fue agregar un tercer potencial al tercer sitio de la pinta $0.05 \cos(\Omega t + \phi_2)$. Repitiendo el mismo procedimiento, se calcularon los coeficientes $\mathcal{T}_{1,1}$, $\mathcal{T}_{1,2}$ y $\mathcal{T}_{2,2}$ y luego los coeficientes $L_{1,1}$, $L_{1,2}$ y $L_{2,2}$. En la figura 3.6(a) se muestra un mapa de color del coeficiente $\mathcal{T}_{1,1}$ como función de la ϕ_2 y ω/ω_c para diferentes valores de ϕ_1 . El efecto que tiene agregar en $\mathcal{T}_{1,1}$ es afectar el comportamiento que tiene en torno al cero levemente. La figura 3.6(b) se muestra a $\mathcal{T}_{1,1}$ como función de ϕ_1 y ϕ_2 a diferentes valores ω/ω_c . Se puede apreciar de esta forma que $\mathcal{T}_{1,1}$ no es sensible al cambio de fases sino a valor de ω/ω_c . El mismo análisis se llevó a cabo para los otros dos coeficientes.

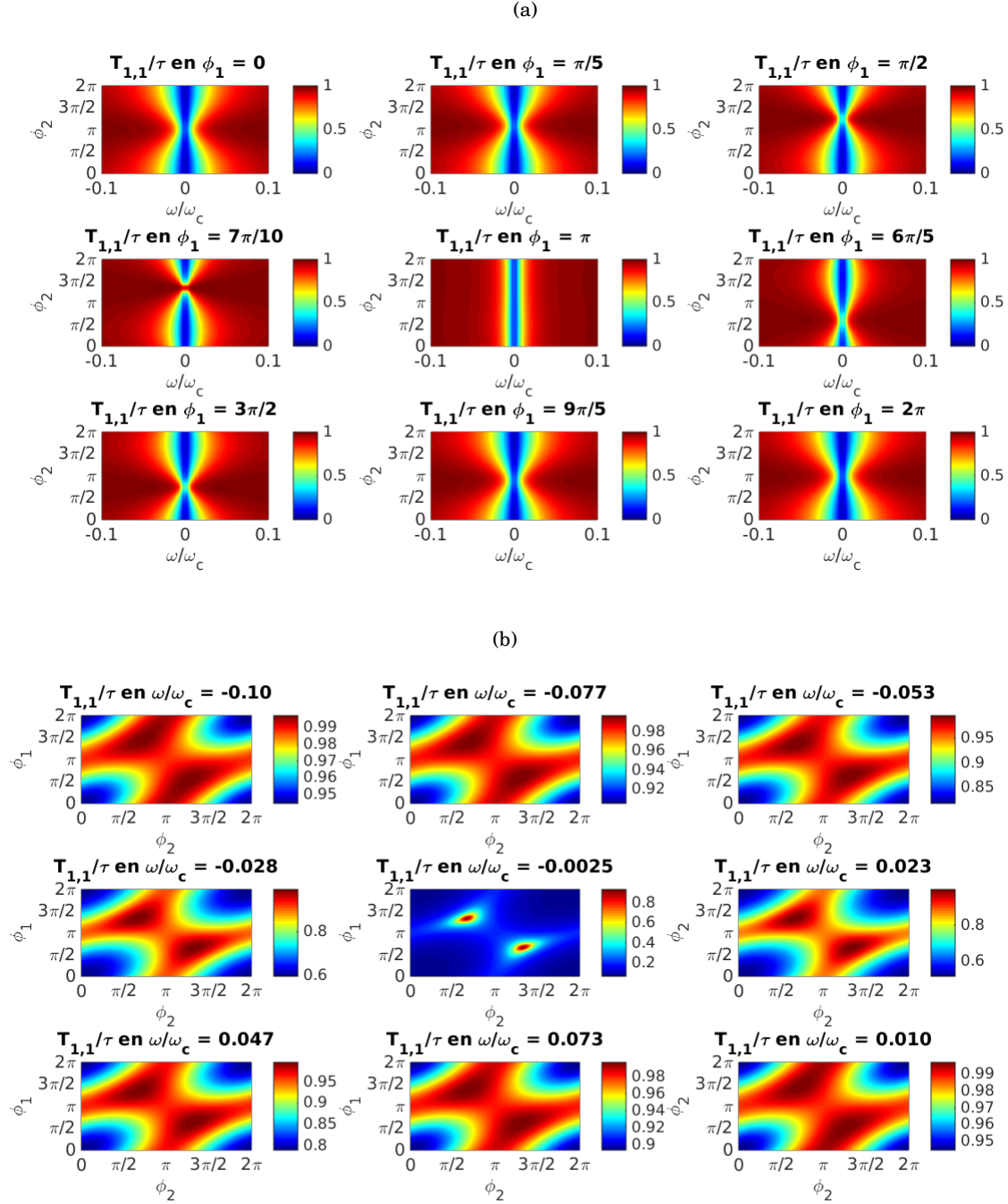


FIGURA 3.6. Mapa de color de $\mathcal{T}_{1,1}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c (figura 3.6(a)) a un ϕ_1 dado y como función de ϕ_2 y ϕ_1 (figura 3.6(b)) para un ω/ω_c dado. $\mathcal{T}_{1,1}$ no es sensible al cambio de fase.

El caso del coeficiente $\mathcal{T}_{1,2}$ es un poco más interesante ya que presenta una estructura diferente. En la figura 3.7 se muestran ambos tipos de mapa de color.

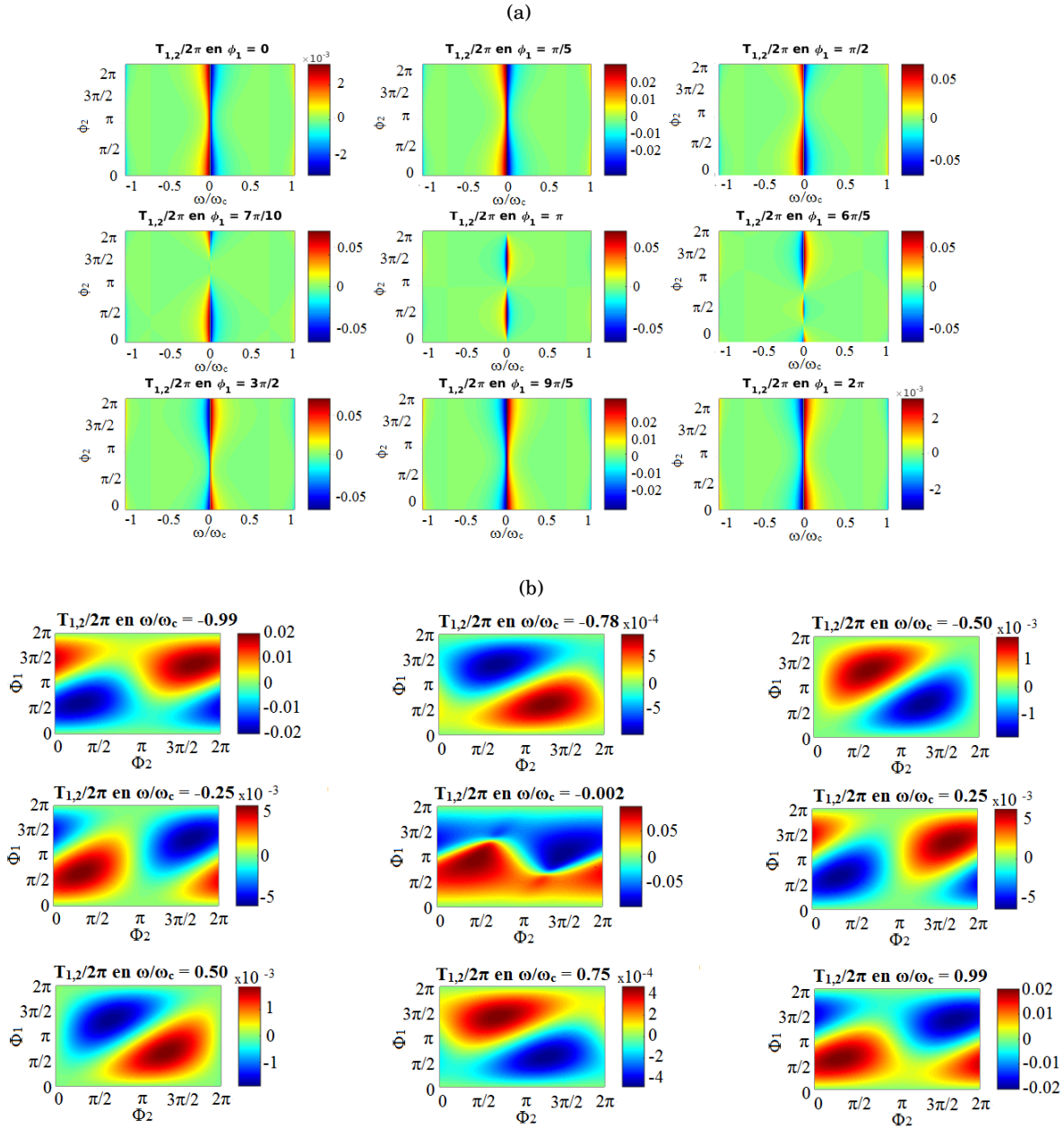


FIGURA 3.7. Mapa de color de $\mathcal{T}_{1,2}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c (figura 3.7(a)) a un ϕ_1 dado y como función de ϕ_2 y ϕ_1 (figura 3.7(b)) para un ω/ω_c dado. $\mathcal{T}_{1,2}$ resulta ser más sensible al cambio de fase que $\mathcal{T}_{1,1}$ ya que cambia la forma y los valores que alcanza a medida que cambia ϕ_1 .

En la figura 3.7(a) se muestra a $\mathcal{T}_{1,2}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c para diferentes ϕ_1 . Se puede apreciar que la forma y valores alcanzados son sensibles al cambio de fase, lo cual no sucedía en el caso anterior. La figura 3.7(b) muestra a $\mathcal{T}_{1,2}$ como función ϕ_1 y ϕ_2 para diferentes valores de ω/ω_c . Esta figura pone en evidencia la dependencia con la fase de $\mathcal{T}_{1,2}$. Siempre se va a poder encontrar una configuración en las fases que haga que $\mathcal{T}_{1,2}$ sea mayor, menor o igual a cero independiente del valor de ω/ω_c . Este resultado va a tener implicaciones en $L_{1,2}$ y por ende en la eficiencia del sistema y su funcionamiento como motor o bomba.

Por otra parte el coeficiente $\mathcal{T}_{2,2}$ no resulta igual de sensible al cambio de fase que $\mathcal{T}_{1,2}$. La figura 3.8(a) muestra al coeficiente $\mathcal{T}_{2,2}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c . El efecto que se persive de cambiar la fase ϕ_1 es de deformar de forma continua los lobulos. En $\phi_1 = 0$ estos se encuentran separados y se van deformando de forma continua hasta tener dos rectas en $\phi_1 = \pi$. Este comportamiento recuerda al del coeficiente $\mathcal{T}_{1,1}$.

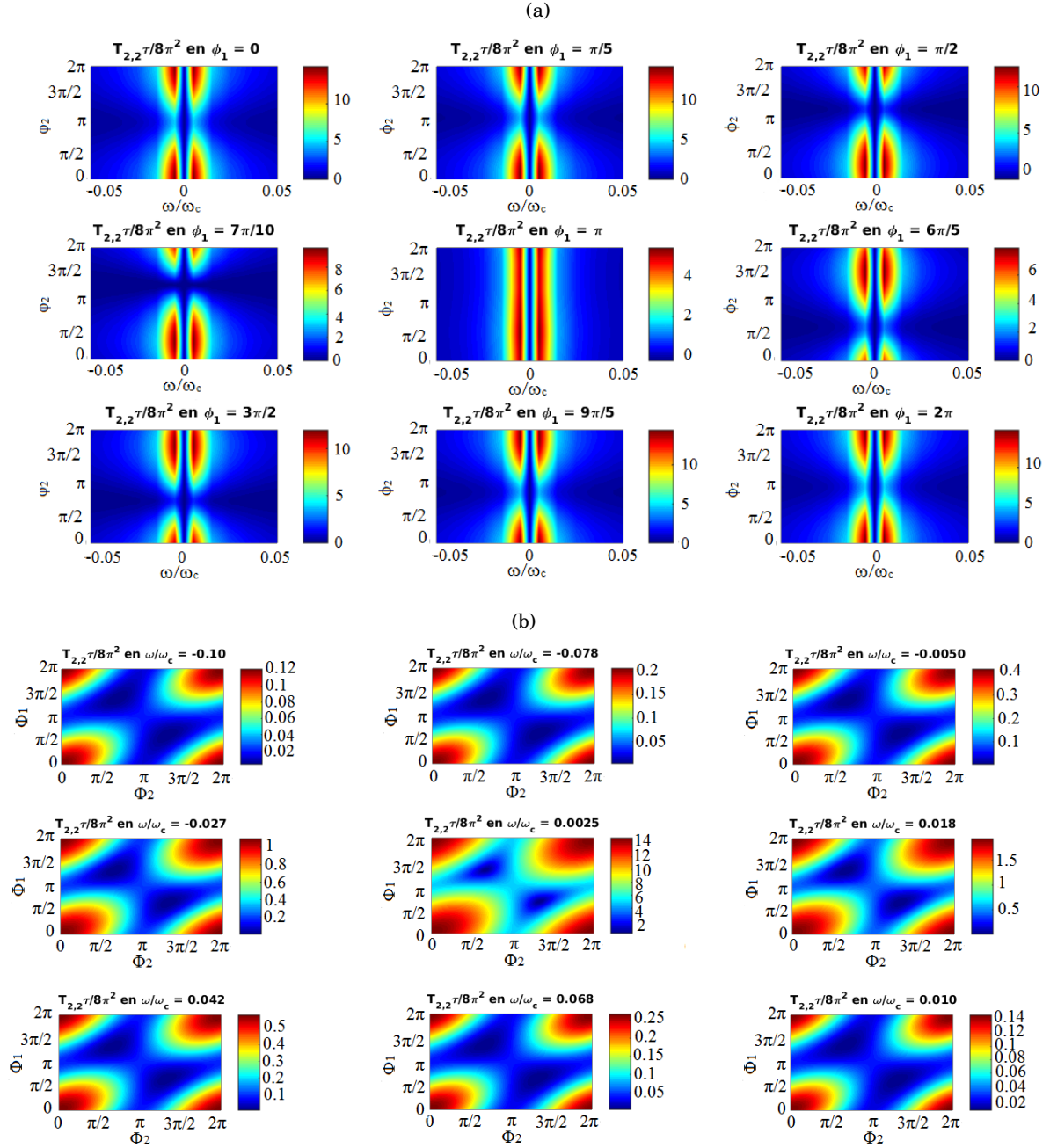


FIGURA 3.8. Mapa de color de $\mathcal{T}_{2,2}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c (figura 3.8(a)) a un ϕ_1 dado y como función de ϕ_2 y ϕ_1 (figura 3.8(b)) para un ω/ω_c dado. $\mathcal{T}_{2,2}$ resulta no ser tan sensible al cambio de fase como lo es $\mathcal{T}_{1,2}$.

Una vez calculados estos coeficientes, se calcularon los coeficientes $L_{1,1}$, $L_{1,2}$ y $L_{2,2}$ que se muestran en las figuras 3.9, 3.10 y 3.11 respectivamente.

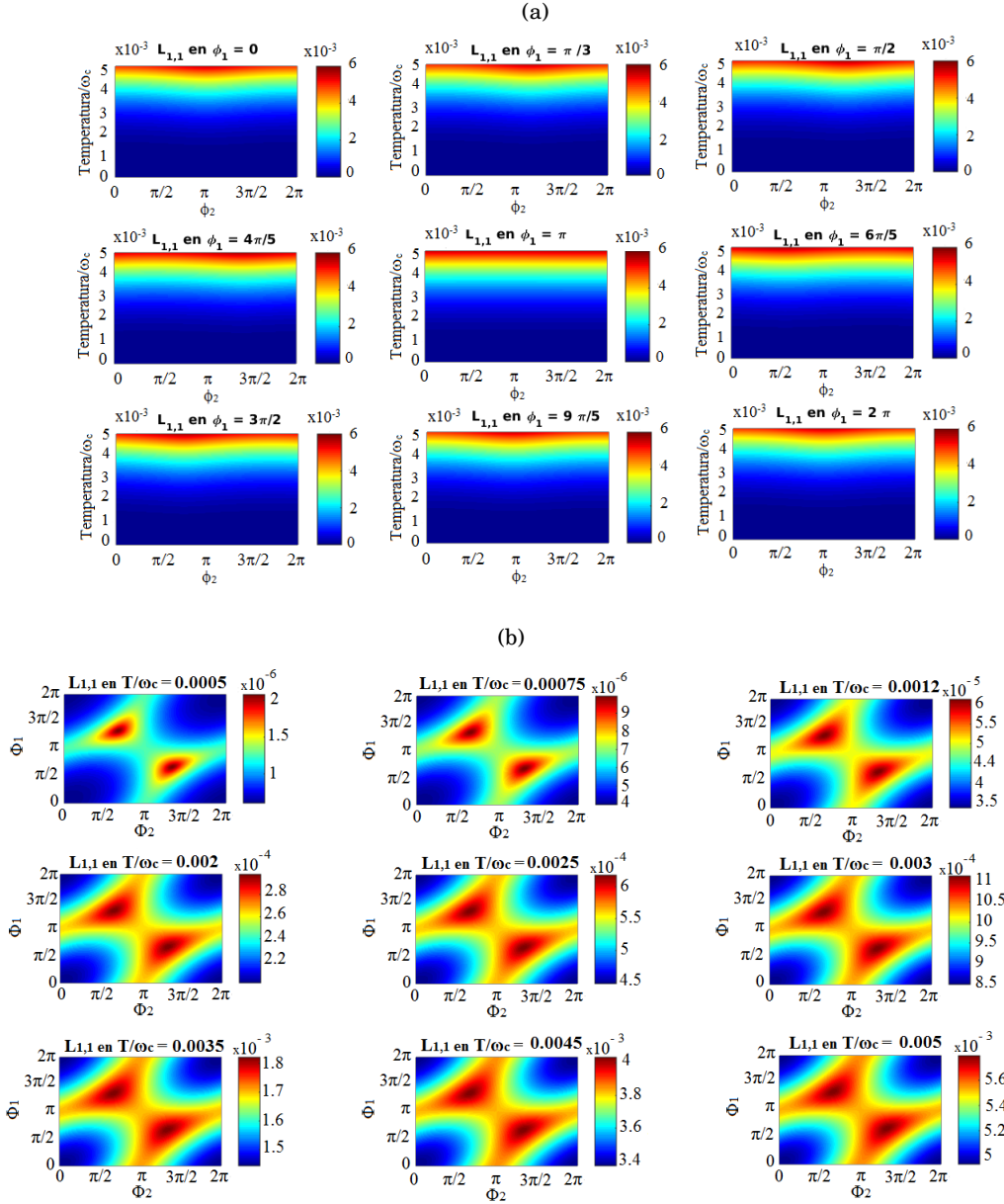


FIGURA 3.9. Mapa de color de $L_{1,1}$ como función de ϕ_2 y T/ω_c (figura 3.9(a)) a un ϕ_1 dado y como función de ϕ_2 y ϕ_1 (figura 3.9(b)) para un T/ω_c dado. El efecto de cambiar la fase no cambia significativamente la forma del potencial.

De la figura 3.9 se puede concluir que el cambiar la fase no afecta la forma de $L_{1,1}$ y se puede apreciar en la figura 3.9(b) ya que para una dada temperatura, las variaciones se mantienen siempre dentro del mismo orden.

De la figura 3.10 se puede apreciar que el efecto de cambiar la fase del potencial cambia la región donde $L_{1,2}$ es positivo, negativo o cero y por lo tanto va a cambiar la región donde el sistema va a trabajar como motor o bomba térmica.

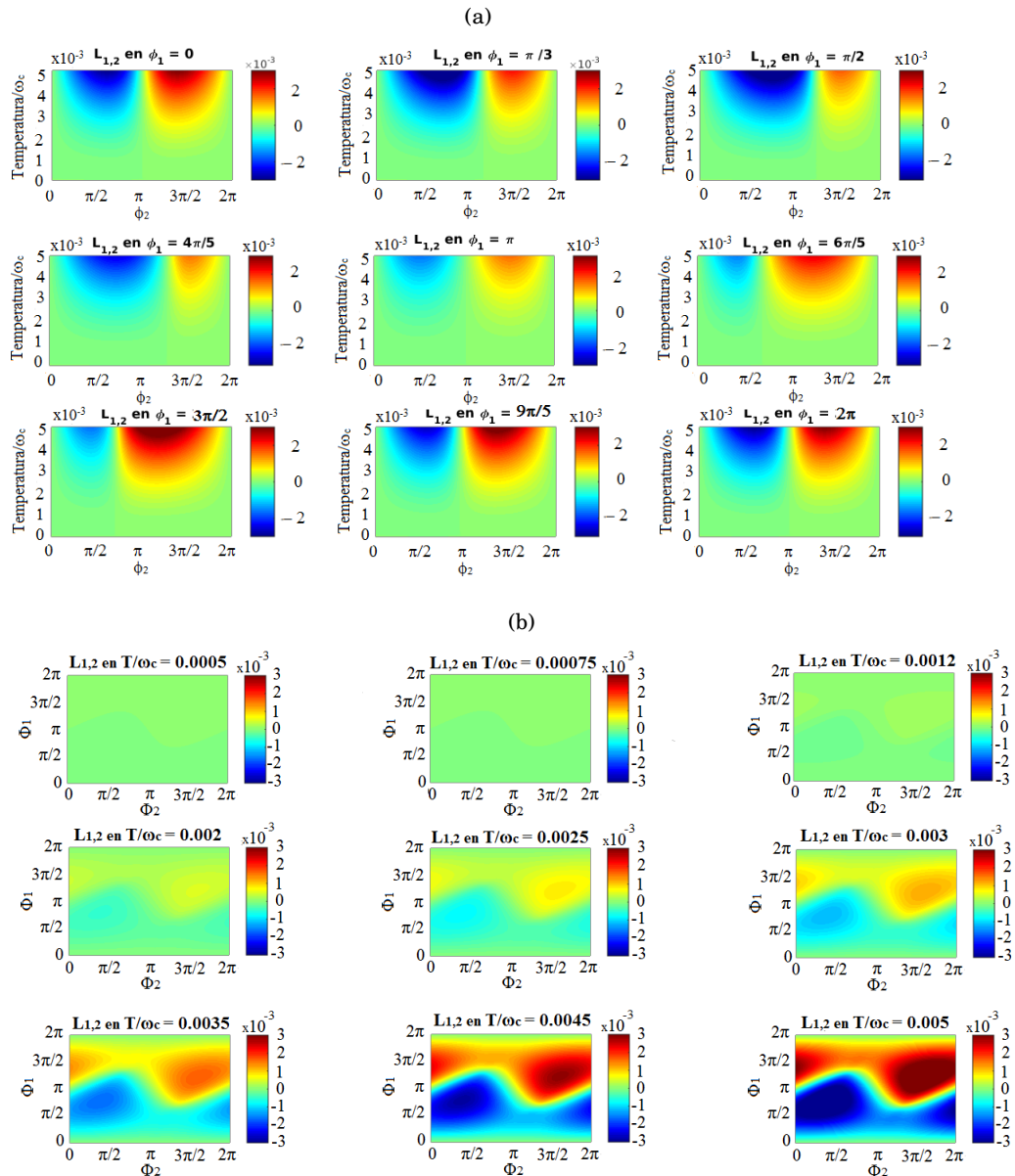


FIGURA 3.10. Mapa de color de $L_{1,2}$ como función de ϕ_2 y T/ω_c (figura 3.10(a)) a un ϕ_1 dado y como función de ϕ_2 y ϕ_1 (figura 3.10(b)) para un T/ω_c dado. El efecto de cambiar la fase cambia la región donde $L_{1,2}$ es positivo, negativo o cero. La temperatura, por otra parte solo hace aumentar el valor del coeficiente sin distorsionar la forma para un ϕ_1 y ϕ_2 dados, es decir, dada una configuración de ϕ 's que extremece a $L_{1,2}$, va a seguir siendo la misma para toda temperatura.

De la figura 3.11 se puede apreciar que cambiar la fase afecta ligeramente al coeficiente $L_{2,2}$. En todos los casos el efecto de la temperatura es cambiar los valores de los coeficientes, si aumenta la temperatura aumenta el valor del coeficiente, sin cambiar la relación que hay entre las fases. Es decir si para una temperatura dada hay una relación de fases que haga que se extremice un coeficiente, esa misma relación se va a mantener para toda temperatura.

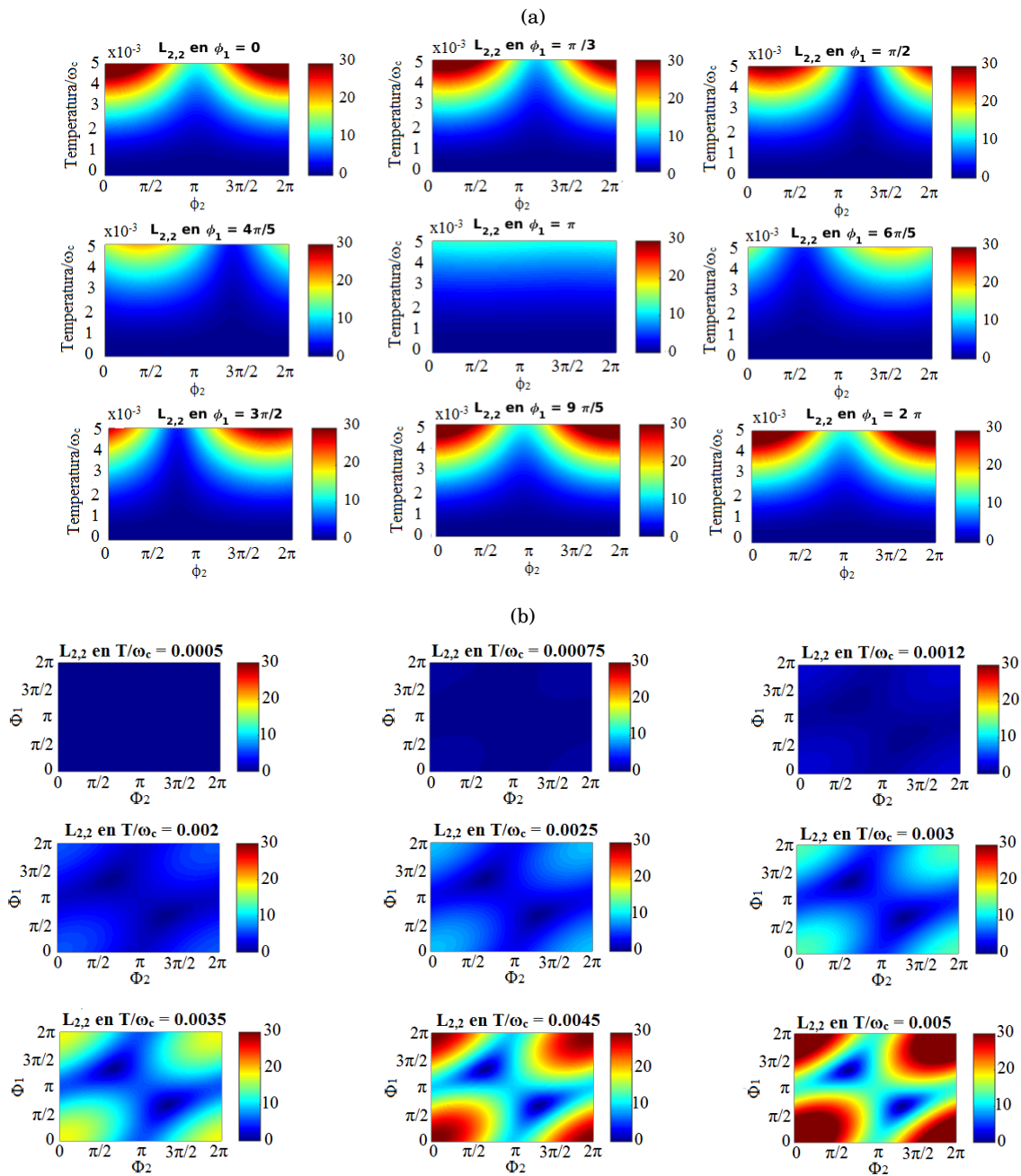


FIGURA 3.11. Mapa de color de $L_{2,2}$ como función de ϕ_2 y T/ω_c (figura 3.11(a)) a un ϕ_1 dado y como función de ϕ_2 y ϕ_1 (figura 3.11(b)) para un T/ω_c dado. El cambiar la fase es cambia ligeramente la forma del potencial. La temperatura, por otra parte solo hace aumentar el valor del coeficiente sin distorcionar la forma para un ϕ_1 y ϕ_2 dados, es decir, dada una configuración de ϕ 's que extremice a $L_{2,2}$, va a seguir siendo la misma para toda temperatura.

Por último se muestra la eficiencia normalizada de esta configuración en la figura 3.12. Introducir un potencial extra con una fase rompe la simetría en el funcionamiento del sistema como motor o bomba que estaba presente en las dos configuraciones anteriores. El intervalo donde va a funcionar el sistema como motor o bomba ya no es simétrico como ocurría en la configuración anterior y los intervalos para cada régimen de funcionamiento están dados por $L_{1,2}$.

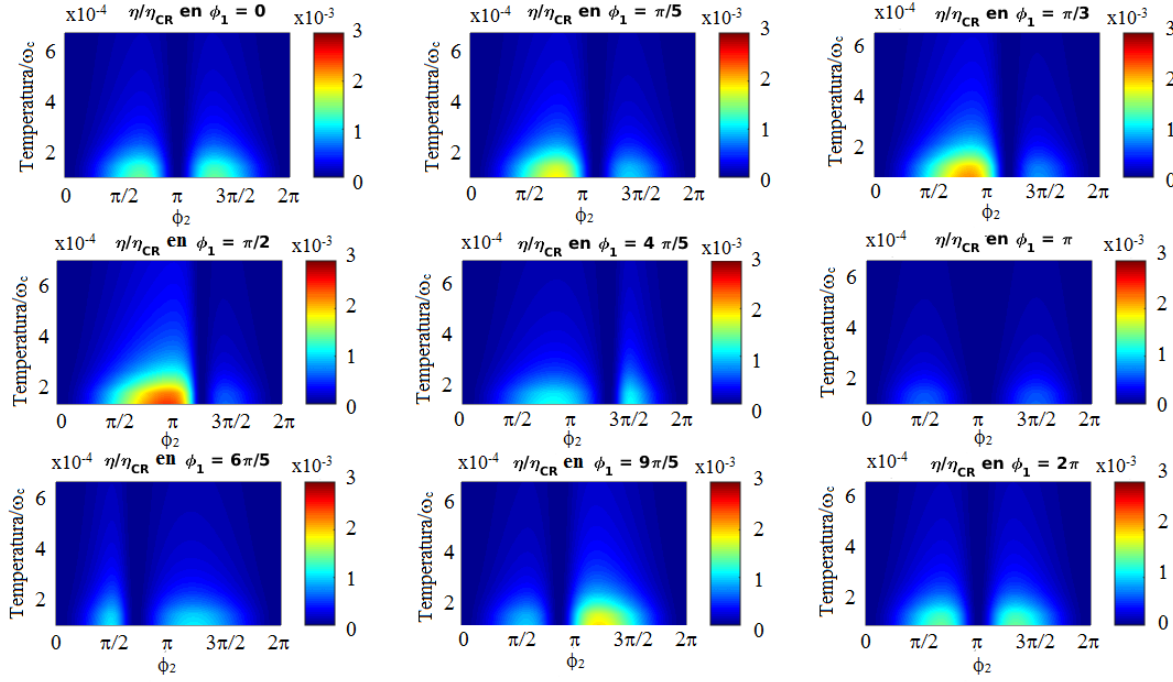


FIGURA 3.12. Mapa de color de η/η_{CR} como función de ϕ_2 y T/ω_c para un ϕ_1 dado. Se puede apreciar que no hay más simetría en el funcionamiento del sistema como motor o bomba como si lo había en las otras dos configuraciones.

Otra diferencia es el máximo valor alcanzado que en este caso está en el orden de 2×10^{-3} (para $\phi_1 = \pi/2$). Si bien sigue siendo bajo, es una mejora en un orden con respecto a las configuraciones anteriores. Lo que tienen en común es que la máxima eficiencia alcanzada en cada situación se da para bajas temperaturas, tanto en el modo de operación de motor como bomba y se vuelve prácticamente cero para $T/\omega_c > 5 \times 10^{-3}$. En conclusión, la introducción de potenciales con diferentes fases hace aumentar la eficiencia mientras que cambiar los parámetros no y el comportamiento frente a la temperatura no se ve afectado. Motivado por este resultado se procedió a estudiar el último caso agrandando el sistema a cinco sitios en la parte central. Los tres primeros potenciales se matuvieron iguales mientras que en el sitio 4 $V_4(t) = 0.05 \cos(\Omega t + \pi)$ y en el sitio 5 $V_5(t) = 0.05 \cos(\Omega t + \pi - 0.001)$. Los gráficos de los coeficientes $\mathcal{T}_{1,1}$, $\mathcal{T}_{1,2}$, $\mathcal{T}_{2,2}$, $L_{1,1}$, $L_{1,2}$ y $L_{2,2}$. se muestran en el apéndice A.2. La eficiencia de esta configuración se muestra en la figura 3.13 Esta configuración, al igual que la anterior, rompe la simetría entre el funcionamiento

motor y bomba. Más aún, en la configuración anterior, dado un valor para ϕ_1 siempre existía un ϕ_2 tal que permitiera cambiar el funcionamiento entre máquina y bomba térmica. Ahora, esta situación no pasa. Por ejemplo para $\phi_1 = 9\pi/5$ el sistema funciona exclusivamente como bomba. Con esta configuración se logró elevar un orden la eficiencia obteniendo un valor máximo de 1.2×10^{-2} en el modo de bomba ($\phi_1 = 9\pi/5$) y a 2.5×10^{-3} en el modo motor ($\phi_1 = 4\pi/5$).

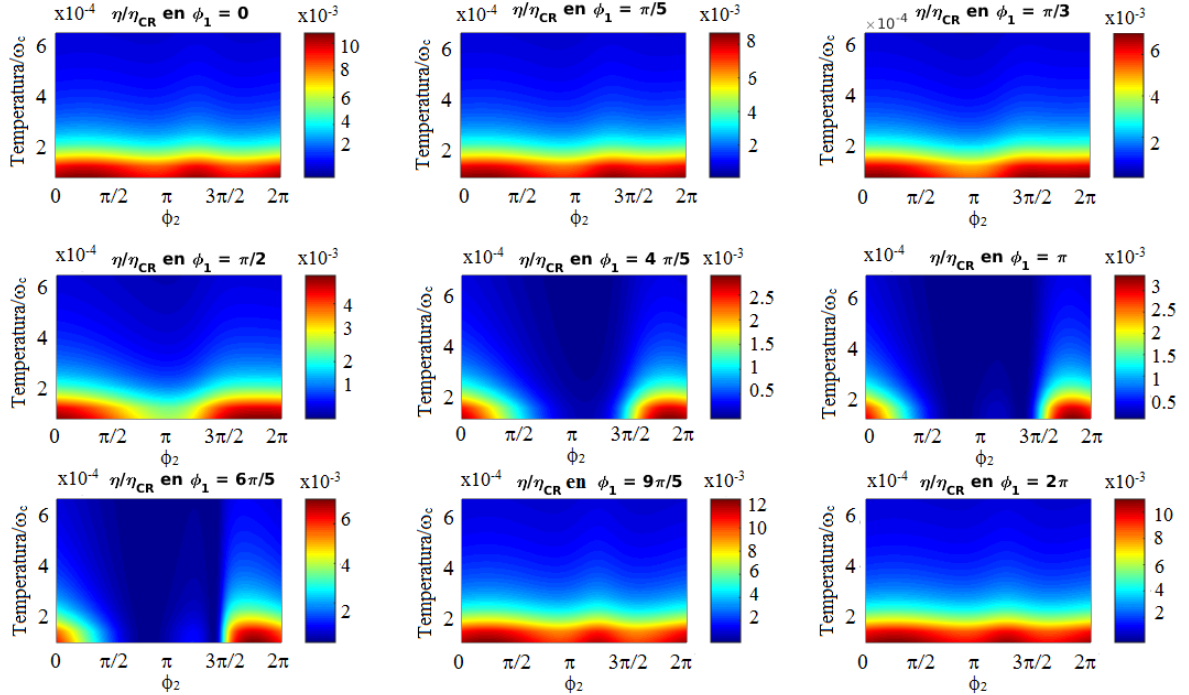


FIGURA 3.13. Mapa de color de η/η_{CR} como función de ϕ_2 y T/ω_c para un ϕ_1 dado. Con esta configuración se puede llegar a un 1.2% de la eficiencia de Carnot.

Este ejemplo vuelve a verificar la afirmación que la eficiencia se aumenta no por cambiar algún parámetro sino por ir aumentando el tamaño del sistema y aplicar a cada sitio un potencial dependiente del tiempo desfasados y se vuelve a dar que la máxima eficiencia de la configuración se da para $T/\omega_c < 2 \times 10^{-3}$.

3.3 Conclusiones

En el presente trabajo se estudió el transporte de calor y la extracción de trabajo en un sistema fonónico sujeto a un potencial externo. El sistema en cuestión se lo modeló como una cadena de osciladores armónicos e interactuaba con dos baños térmicos. Siguiendo el análisis para transporte termoeléctrico de la referencia [3] y teniendo en cuenta los resultados para los casos fonónicos de las referencias [1, 2] se obtuvieron expresiones para la corriente de energía, calor, trabajo y eficiencia. En el capítulo 1 se presentó el formalismo de Green que permitió calcular los flujos y variaciones presentadas en el capítulo 3. En el capítulo 2 se hizo un análisis termodinámico guiado en el análisis por la referencia [4]. Las expresiones difieren ligeramente ya que en el caso de fonones no hay transporte de partículas y por lo tanto no hay trabajo eléctrico, que si lo hay en el caso de electrones.

Se estudio también cómo funciona el sistema como motor y bomba térmica para cuatro configuraciones. En las tres primeras el tamaño del sistema en la parte central era el mismo, tres sitios, mientras que en la cuarta configuración habían cinco sitios. La primera configuración tenía dos potenciales dependientes del tiempo con una diferencia de fase entre ellos. El segundo diferiría del primero en el cambio de uno de los parámetros, $\omega_R = 1$ en la primera y $\omega_R = 0.4$. La tercera configuración diferiría de las otras dos en que se agregó un potencial extra con una diferencia de fase extra. Comparando los tres resultados se puede decir que conviene agregar un potencial extra en otro sitio a cambiar un parámetro. Además esta configuración rompía una simetría entre el funcionamiento como motor y bomba. Esto motivo a la cuarta configuración, agrandar el sistema a cinco sitios y poner dos potenciales extra con las diferencias de fase que optimizaban los casos anteriores y resultó que la eficiencia aumentaba. La característica general a todas las configuraciones es su comportamiento al cambio de temperatura. Todas las configuraciones tienen la máxima eficiencia para $T/\omega_c < 2 \times 10^{-3}$ y se vuelve prácticamente cero para $T/\omega_c > 5 \times 10^{-3}$. Aunque de todas formas siempre la eficiencia era muy pobre comparada con la de Carnot y comparada con la referencia [2]. En el mejor de los casos se obtuvo un valor cercano al orden de 1% mientras que en el trabajo citado se llega a la eficiencia de Carnot si la temperatura de ambos reservorios coincide. Si se quiere mantener el mismo espíritu, para aumentar la eficiencia, habría que agrandar la parte central del sistema y aplicar a cada sitio un potencial con fase diferente. Quedan pendientes varios aspectos por entender, por ejemplo de que factores depende la temperatura a la cuál la eficiencia es máxima. También como es el aumento de la eficiencia con respecto al aumento de sitios que tienen potenciales aplicados en el sistema central y si para algún tamaño se puede alcanzar el límite de Carnot.



A.1 Código utilizado

En este apéndice se muestra el código utilizado para obtener los coeficientes $\mathcal{T}_{1,1}$, $\mathcal{T}_{1,2}$ y $\mathcal{T}_{2,2}$. El programa está escrito en Fortran 2003. El programa utiliza a los paquetes «liblapack» y «libblas»

```

1  module Green
3
3  use, intrinsic :: iso_fortran_env, only: dp => real64
   implicit none
5
   real(dp), public, parameter :: wl = 1.0d0
7   real(dp), public, parameter :: wr = 1.0d0
   integer, public, parameter :: matrix_size = 5
9   real(dp), public, parameter :: Time_Omega = .001d0
   ! Defino parametros comunes a todo el programa.
11  ! wl y wr son las constantes de cada reservorio y Time_Omega la frecuencia del potencial
13
13  type ptr_wrapper
   procedure(f2M), nopass, pointer :: func
15 end type ptr_wrapper
17
17  abstract interface
   function g1g(Temp1,x1,x2,xf1,xf2)
19  ! Interface abstracta para funciones reales de cuatro variables
   !Temp1 x1=tiempo,x2=w, xf1= fase1, xf2=fase2 .
21   import
   real(dp), intent(in) :: x1,x2, Temp1,xf1,xf2
23   real(dp) :: g1g

```

```

    end function g1g
25 end interface

    abstract interface
27     function g1g2(x1,x2,xf1,xf2)
29 ! Interfase abstracta para funciones reales de cuatro variables
!x1=tiempo,x2=w, xf1= fase1, xf2=fase2 .
31     import
        real(dp), intent(in) :: x1,x2,xf1,xf2
33     real(dp) :: g1g2
    end function g1g2
35 end interface

37

39     abstract interface
        function f1M(x1,xf1,xf2)
41 ! Interfase abstracta para matrices reales de dos variables,
!x1=tiempo,xf1 = fase1, xf2=fase2
43     import
        real(dp), intent(in) :: x1,xf1,xf2
45     real(dp), dimension(matrix_size,matrix_size) :: f1M
    end function f1M
47 end interface

49

51     abstract interface
        function f2M(x1,x2,xf1,xf2)
53 !Interfase abstracta para matrices complejas de tres variables
!x1= tiempo, x2= w, xf= fase
55     import
        real(dp), intent(in) :: x1,x2,xf1,xf2
        complex(dp), dimension(matrix_size,matrix_size) :: f2M
57     end function f2M
    end interface

59 contains

61 ! Funci\`on GammaL y GammaR
63 function GammaL(w) result (GL)
    real(dp),intent(in) :: w
65     real(dp) :: aux_wl
    integer :: i,j
67     real(dp) :: GL(matrix_size,matrix_size)
    do i = 1, matrix_size
69         do j= i, matrix_size
            GL(i,j)=0d0

```

```

71     GL(j,i) = 0d0
       end do
73 end do

75     aux_wl = 1.0d0-(w**2.0d0)/(2d0*wl**2.0d0)

77     GL(1,1) =2.0d0*wl**2.0d0*dsqrt(1.0d0-aux_wl**2.0d0)*sign(1.0d0,w)

79

81 end function GammaL

83 function GammaR(w) result (GR)
   real(dp),intent(in) :: w
   real(dp) :: aux_wr
85   integer :: i,j
   real(dp) :: GR(matrix_size , matrix_size)
87   do i = 1,matrix_size
       do j=i,matrix_size
89         GR(i,j)=0d0
           GR(j,i) = 0d0
91       end do
     end do
93

95     aux_wr = 1.0d0-(w**2.0d0)/(2.0d0*wr**2.0d0)

97     GR(matrix_size , matrix_size) =2.0d0*wr**2.0d0*dsqrt(1.0d0-aux_wr**2.0d0)*sign(1.0d0,w)

99

101 end function GammaR

103 ! Calculo la funci\on de Green G0^-1
   function Green0inv(w) result(G0inv)
105     real(dp), intent(in) :: w
       real(dp), dimension(matrix_size , matrix_size) :: HC, Omega
107     complex(dp), dimension(matrix_size , matrix_size) :: Sigma
       complex(dp), dimension(matrix_size , matrix_size) :: G0inv
109 ! Genero matrices HC = Hamiltoniano, Sigma = Lambda + i/2 Gamma.
       ! Omega = w^2 Identidad
111 ! G0inv es el resultado

113     integer :: i,j
       complex(dp) :: S11, Snn
115     real(dp) :: aux_wr1, aux_wl1
       aux_wr1 = 1-w**2/(2d0*wr**2.0d0)
117     aux_wl1 = 1-w**2/(2d0*wl**2.0d0)

```

```

119 ! Sigma = Lambda + i/2 Gamma
120 ! Con Lambda = 1/2(w^2-2wL^2)
121 ! Y GammaL = 2*wL^2 Sqrt(1-(1-w**2/(2wL^2)))*sign(w)*Theta(1-(1-w^2/(2wL))^2)

123 S11 = dcplx(.5 d0*(w**2.0d0-2d0*wl**2.0d0),&
124         -wL**2.0d0*dsqrt(1.0d0-aux_wL1**2.0d0)*sign(1.0d0,w)
125 Snn = dcplx(.5 d0*(w**2.0d0-2d0*wr**2.0d0),&
126         -wr**2.0d0*dsqrt(1.0d0-aux_wr1**2.0d0)*sign(1.0d0,w)
127
128
129 do i = 1,matrix_size
130     do j=i,matrix_size
131         Omega(i,j) = 0d0
132         Omega(j,i) = Omega(i,j)
133         Sigma(i,j) = dcplx(0d0,0d0)
134         Sigma(j,i) = Sigma(i,j)
135     end do
136 end do
137
138 Sigma(1,1) = S11
139 Sigma(matrix_size,matrix_size) = Snn
140
141 do i = 1,matrix_size
142     Omega(i,i) = w**2.0d0
143 end do
144 ! w_central^2=1
145 do i = 1, matrix_size
146     do j = i+2, matrix_size
147         HC(i,j) = 0d0
148         HC(j,i) = 0d0
149     end do
150     HC(i,i+1) = -1d0
151     HC(i+1,i) = HC(i,i+1)
152     HC(i,i) = 2.0d0
153 end do
154
155 HC(1,1) = wl**2.0d0 + 1d0
156 HC(matrix_size,matrix_size) = wR**2.0d0 + 1.0d0
157
158 G0inv = Omega - HC - Sigma
159
160 end function Green0inv
161
162
163 ! Cargo el potencial

```

```

165 function Potential(time, fase1, fase2) result(V)
166     real(dp), intent(in) :: time, fase1, fase2
167     real(dp), dimension(matrix_size, matrix_size) :: V
168     integer, parameter :: p1 = 1, p2 = 2, p3 = 3
169     integer :: i, j
170     ! p es la posicion de los potenciales dependientes del tiempo
171     do i = 1, matrix_size
172         do j = i, matrix_size
173             V(i, j) = 0d0
174             V(j, i) = 0d0
175         end do
176     end do
177
178     V(p1, p1) = .05d0 * dcos(Time_Omega * time)
179
180     V(p2, p2) = .05d0 * dcos(Time_Omega * time + fase1)
181
182     V(p3, p3) = .05d0 * dcos(Time_Omega * time + fase2)
183
184     V(4, 4) = .05d0 * dcos(Time_Omega * time + dacos(-1.0d0) / 2)
185
186     V(5, 5) = .05d0 * dcos(Time_Omega * time + dacos(-1.0d0) / 2 - .001)
187
188 end function Potential
189
190 ! Calculo Gfrozen = [G0inv - V(time)]^(-1)
191
192 function Greenfrozen(time, w, fase1, fase2) result(Gfrozen)
193     implicit none
194     external liblapack
195     real(dp), intent(in) :: time, w, fase1, fase2
196     complex(dp), dimension(matrix_size, matrix_size) :: Gfrozen, Gaux
197     DOUBLE PRECISION, ALLOCATABLE, DIMENSION(:) :: WORK
198     Integer :: LWORK = matrix_size * matrix_size
199     Integer, Allocatable, dimension(:) :: IPIV
200     Integer :: INFO, LDA = matrix_size, M = matrix_size, N = matrix_size
201     Integer DeAllocateStatus
202
203     allocate(work(Lwork))
204     allocate(IPIV(N))
205
206     ! Hago una matriz auxiliar para luego invertirla
207     Gaux = Green0inv(w) - Potential(time, fase1, fase2)
208
209     CALL ZGETRF (M, N, Gaux, LDA, IPIV, INFO)
210
211 ! This calculates LU decomposition of a matrix and overwrites it

```



```

213     CALL ZGETRI(N, Gaux, N, IPIV, WORK, LWORK, INFO)
! This calculates the inverse of a matrix knowing its LU decomposition and overwrites it
215
    Gfrozen = Gaux
217
    DEALLOCATE (IPIV, STAT = DeAllocateStatus)
219    DEALLOCATE (WORK, STAT = DeAllocateStatus)

221 end function Greenfrozen

223 function Derivate0(x1,xf1,xf2,G) result(DV)
! Derivada para matrices reales de dos variables con respecto a la primer variable
225     implicit none
    real(dp),intent(in) :: x1,xf1,xf2
227     procedure(fIM) :: G
    real(dp) :: DV(matrix_size,matrix_size)
229 !     real(dp) :: h = 1.0E-6_dp
    real(dp) :: h = .0000001
231     DV = (1.0d0*G(x1-2.0d0*h,xf1,xf2)- 8.0d0*G(x1-h,xf1,xf2) &
        + 8.0d0*G(x1+h,xf1,xf2)- 1.0d0*G(x1+2.0d0*h,xf1,xf2))/(12d0*h)
233

235 end function Derivate0

237
! Derivada del potencial
239
function DPotential(time,fase1,fase2) result(DPot)
241     real(dp),intent(in) :: time,fase1,fase2
    real(dp) :: DPot(matrix_size,matrix_size)
243     DPot = Derivate0(time,fase1,fase2,Potential)

245 end function DPotential

247

249 function DGfrozent(time,w,fase1,fase2) result (DGFT)
! Derivada de la func. de Green con respecto al tiempo.
251 ! Utilizo a la derivada del potencial
    real(dp),intent(in) :: time,w,fase1,fase2
253     complex(dp),dimension(matrix_size,matrix_size)::DGFT,DGFT1
    DGFT1 = matmul(Greenfrozen(time,w,fase1,fase2),DPotential(time,fase1,fase2))
255     DGFT = matmul(DGFT1,Greenfrozen(time,w,fase1,fase2))
    end function DGfrozent
257

```

```

259 end module Green
261
263
265 use, intrinsic :: iso_fortran_env, only: dp => real64
266 use Green
267 implicit none
269
271 contains
273
274 function T11(time,w,fase1,fase2)
275
276     real(dp),intent(in)::time,w,fase1,fase2
277     complex(dp),dimension(matrix_size,matrix_size)::GFF,GFR,GFC
278     complex(dp)::tracevector(matrix_size)
279     integer::i
280     real(dp)::T11
281     GFR = matmul(Greenfrozen(time,w,fase1,fase2),GammaR(w))
282     GFC = matmul(conjg(transpose(Greenfrozen(time,w,fase1,fase2))),GammaL(w))
283
284     GFF = matmul(GFR,GFC)
285     tracevector(1) = GFF(1,1)
286     do i = 2,matrix_size
287         tracevector(i) = tracevector(i-1) + GFF(i,i)
288     end do
289     T11 = dreal(tracevector(matrix_size))
290
291 end function T11
292
293 function T12(time,w,fase1,fase2)
294
295     real(dp),intent(in)::time,w,fase1,fase2
296
297     complex(dp),dimension(matrix_size,matrix_size)::GFL,DGF,GFF
298     complex(dp)::tracevector(matrix_size)
299     integer::i
300     real(dp)::T12
301
302     GFL = matmul(Greenfrozen(time,w,fase1,fase2),GammaL(w)+GammaR(w))
303
304     DGF = matmul(conjg(transpose(DGfrozent(time,w,fase1,fase2))),GammaR(w))
305

```

```

307     GFF = matmul(GFL,DGF)

309     tracevector(1) = GFF(1,1)
311     do i = 2,matrix_size
313         tracevector(i) = tracevector(i-1) + GFF(i,i)
315     end do
317     T12 = dimag(tracevector(matrix_size))

319 end function T12

321 function T22 (time,w,fase1 , fase2)
323     real(dp),intent(in) :: time,w,fase1 , fase2
325     complex(dp),dimension(matrix_size , matrix_size) :: DGFL, DGFC, DGF
327     complex(dp) :: tracevector(matrix_size)
329     real(dp):: T22
331     integer:: i
333     DGFL = matmul(DGfrozent(time,w,fase1 , fase2),GammaL(w)+GammaR(w))
335     DGFC = matmul(conjg(transpose(DGfrozent(time,w,fase1 , fase2))),GammaL(w)+GammaR(w))
337     DGF = matmul(DGFL,DGFC)

339     tracevector(1) = DGF(1,1)
341     do i = 2,matrix_size
343         tracevector(i) = tracevector(i-1)+ DGF(i,i)
345     end do

347     T22 = drealm(tracevector(matrix_size))

349 end function T22

351 subroutine DGS0(x1,x2,y,xf1 ,xf2 ,fx ,S)
353 ! voy a tener que hacer dos integraciones. En t y en w. Primero integro en t
355 ! Solo va a integrar a los Tij, y solo en el tiempo
357 ! Integra por gausseanos. LLama a la function DGS8.
359 !
361 ! y1 y y2 son los limites , fx es el integrando y S el resultado.
363 !
365 ! Ejemplo call DGS0 (timein,timeend, wvec(i),Fase(j),Fase(k), L22_ptr,L22f)
367 ! Voy a integrar en la segunda variable

369     real(dp), intent(in) :: y,xf1 ,xf2
371     real(dp), intent(in) :: x1, x2
373     procedure(gl2), pointer :: fx

375     real(dp):: u, v, c, sl, sg, sp, sa, sf

```

```

353  real(dp), intent(out) :: S
354  real(dp) :: eps = 1.0E-6
355
356  S = 0d0
357  U = x1
358  1  V = x2
359  IF ( U .LT. x2 ) THEN
360     SF = DGS8 (u,v,y,xf1,xf2,fx)
361  2  C = (U+V)/2d0
362     SL = DGS8 (u,c,y,xf1,xf2,fx)
363     SG = DGS8 (c,v,y,xf1,xf2,fx)
364     SP = SL+SG
365     SA = DABS(SP-SF)/EPS
366     IF ( SA.GE.1.D0 ) THEN
367         V = C
368         SF = SL
369         GOTO 2
370     END IF
371     U = V
372     S = S+SP
373     GOTO 1
374 END IF
375 end subroutine DGS0
376
377 function DGS8(x1,x2,y,xf1,xf2,fx) result (d)
378 ! rutina que integra. Es llamada por DGS0.
379 ! y1 y y2 son los l'imites, fx la funci'on, del resultado
380 implicit none
381 real(dp), intent(in) :: y,xf1,xf2
382 real(dp), intent(in) :: x1, x2
383 procedure(glg2), pointer :: fx
384
385 real(dp) :: d
386 real(dp) :: c,h,X,S
387 c = (x1+x2)/2
388 h = (x2-x1)/2
389 X= .960289856497536D0*H
390 S = .101228536290376D0*(fx(C+X,y,xf1,xf2)+fx(C-X,y,xf1,xf2))
391 X = .796666477413627D0*H
392 S = S + .222381034453374D0*(fx(C+X,y,xf1,xf2)+fx(C-X,y,xf1,xf2))
393 X = .525532409916329D0*H
394 S = S + .313706645877887D0*(fx(C+X,y,xf1,xf2)+fx(C-X,y,xf1,xf2))
395 X = .183434642495650D0*H
396 S = S + .362683783378362D0*(fx(C+X,y,xf1,xf2)+fx(C-X,y,xf1,xf2))
397 d = S * H
398 end function DGS8

```

```

401 !=====
403
405 end module Corrientes
407
408 program NTransmision
409 use, intrinsic :: iso_fortran_env, only: dp => real64
410 use Corrientes
411 use Green
412 ! Llamo a los m'odulos
413
414 ! Creo las variables
415 real(dp) :: timein, timeend, T22f, T12f, T11f
416
417 real(dp) :: win1 = -2.0d0*wr
418 real(dp) :: wend1 = 2.0d0*wr
419
420 real(dp) :: win2 = -0.00001d0*wr
421 real(dp) :: wend2 = 0.00001d0*wr
422
423
424
425 integer, parameter :: timelength = 100, faselength=100
426
427
428
429 complex(dp), dimension(matrix_size, matrix_size) :: GF, GF1, GF2
430 real(dp), dimension(matrix_size, matrix_size) :: GL, GR
431
432 ! Creo los punteros que van a apuntar a las funciones
433
434 procedure(g1g2), pointer :: T22_ptr, T12_ptr, T11_ptr
435
436
437 real(dp), dimension(timelength) :: timevec
438
439 real(dp), dimension(4*timelength) :: wvec2
440 real(dp), dimension(4*timelength) :: wvec1
441 real(dp), dimension(faselength) :: Fase
442
443 ! Estas matrices las deajo por si quiero ver algo con las matrices Gfrozen
444 !complex(dp), dimension(matrix_size, matrix_size) :: GF
445 !real(dp), dimension(matrix_size, matrix_size) :: GL, GR

```

```
447 real(dp) :: timewth, aux_wr, aux_wL
449 integer :: i, j, k, m
451 timein = 0.0d0
453 timeend = 2.0d0*dacos(-1.0d0)/Time_Omega
455
457 ! Vectores con elementos igualmente distribuidos para Temperatura tiempo, fase y omega
459 do i =1, timelength
    timevec(i) = (i-1)*(timeend-timein)/(timelength-1) +timein
461 end do
463
465 do i =1, faselength
    Fase(i) =2* (i-1)*dacos(-1.0d0)/(faselength-1)
467 end do
469 do i=1, size(wvec1)
    wvec1(i) = (i-1)*(wend1-win1)/(size(wvec1)-1) + win1
471 end do
473 do i = 1, size(wvec2)
    wvec2(i) = (i-1)*(wend2-win2)/(4*timelength-1) + win2
475 end do
477 ! Ac\`a digo a donde apuntan los punteros
479 T22_ptr => T22
    T12_ptr => T12
481 T11_ptr => T11
483
485 !=====
487 ! CON UN POTENCIAL
    ! DESCOMENTAR LINEA 166
489
491 open(unit=1, file = 'T11Nuevo2N5.dat')
493 do i = 1, size(wvec1)
    do j=1, faselength
```

```

    do k =1,faselength
495     call DGS0 (timein ,timeend ,wvec1(i) ,Fase(j) ,Fase(k) ,T11_ptr ,T11f)
        write(1,*) T33f
497     print* , i ,j ,k
    end do
499 end do
end do
501
close (unit = 1)
503
open(unit=2, file = 'T12Nuevo2N5.dat')
505
do i = 1,size(wvec1)
507     do j=1, faselength
        do k =1,faselength
509             call DGS0 (timein ,timeend ,wvec1(i) ,Fase(j) ,Fase(k) ,T12_ptr ,T12f)
                write(2,*) T23f
511             print* , i ,j ,k
        end do
513     end do
end do
515
close (unit = 2)
517
519 open(unit=3, file = 'T22Nuevo2N5.dat')
521
do i = 1,size(wvec1)
    do j=1, faselength
523         do k =1,faselength
            call DGS0 (timein ,timeend ,wvec1(i) ,Fase(j) ,Fase(k) ,T22_ptr ,T22f)
525             write(3,*) T22f
                print* , i ,j ,k
527         end do
            end do
529 end do
531 close (unit = 3)
533
535
537
!!! Veo un coeficiente como funci\`on de t y w
539 !open(unit=1, file = 'T33TIEMPOW3.dat')
```

```

541 ! do i = 1, timelength
!   do j = 1, size(wvec)
543 !!   do k = 1, faselength
!!     do m = 1, faselength
545 !       T33f = T33(timevec(i),wvec2(j),Fase(30),Fase(1))
!         write(1,*) T33f
547 !         print*,i
!!       end do
549 !!     end do
!   end do
551 ! end do

553 !close (unit = 1)

555 !=====

557 print*, 'done :)'

559
end program NTransmission

```

A.2 Gráfico de coeficientes

En esta sección se presentan los gráficos de los coeficientes $\mathcal{T}_{1,1}$, $\mathcal{T}_{1,2}$, $\mathcal{T}_{2,2}$, $L_{1,1}$, $L_{1,2}$ y $L_{2,2}$ de la cuarta configuración estudiada en 3.2.

La figura A.1 muestran los mapas de color del coeficiente $\mathcal{T}_{1,1}$

En caracter general no hay mucha diferencia entre 3.6(a) y A.1(a). En donde si hay diferencia es entre las figuras A.1(b) y 3.6(b).

En la figura A.2 se muestra el mapa de color de $\mathcal{T}_{1,2}$

En la figura A.3 se muestran los mapas de color de $\mathcal{T}_{2,2}$.

En la figura A.4 se muestran los mapas de color del coeficiente $L_{1,1}$.

En la figura A.5 se muestran los mapas de color del coeficiente $L_{1,2}$. A diferencia de la figura 3.10 dado un ϕ_1 no siempre va a existir un ϕ_2 que haga que cambie de signo. Esto va a tener influencia en el modo de funcionamiento del sistema.

En la figura A.6 se muestran los mapas de color para el coeficiente $L_{2,2}$

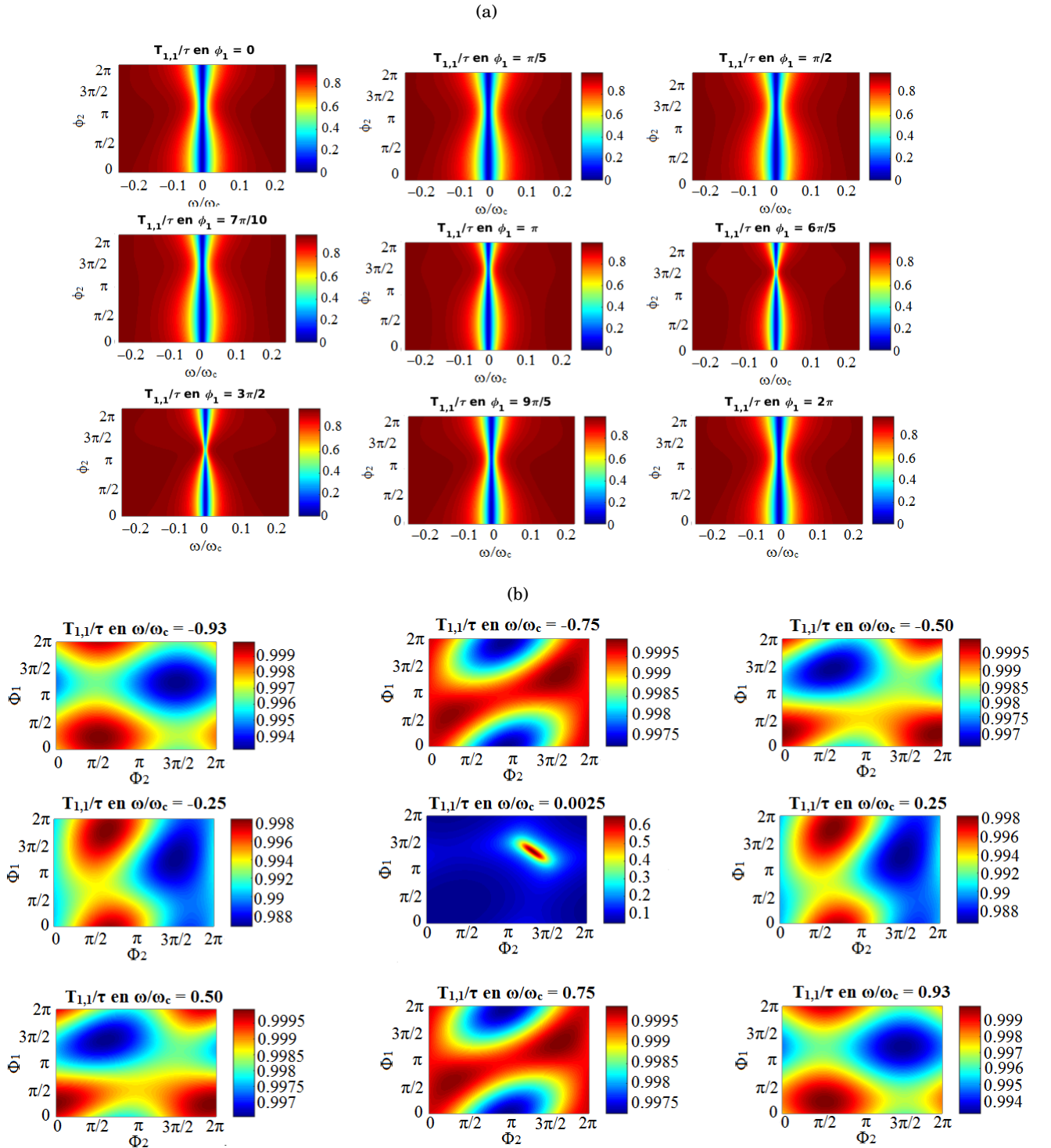


FIGURA A.1. Mapa de color de $\mathcal{T}_{1,1}$ con 5 sitios en la parte central. En la figura A.1(a) se muestra muestra a $\mathcal{T}_{1,1}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c a un ϕ_1 dado. En la figura A.1(b) se muestra a $\mathcal{T}_{1,1}$ como función de ϕ_1 y ϕ_2 a un ω/ω_c dado.

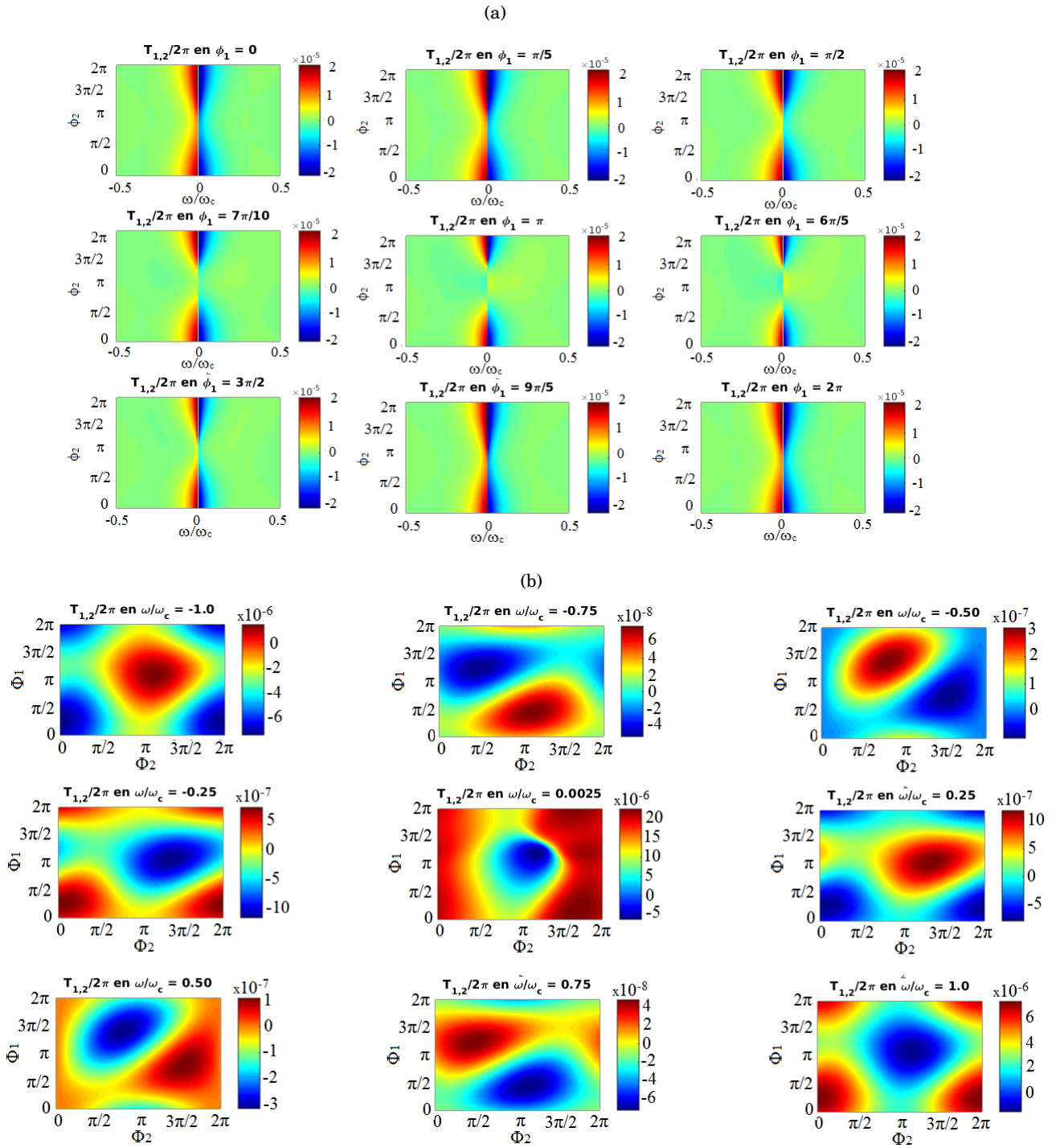


FIGURA A.2. Mapa de color de $\mathcal{T}_{1,2}$ con 5 sitios en la parte central. En la figura A.2(a) se muestra muestra a $\mathcal{T}_{1,2}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c a un ϕ_1 dado. En la figura A.2(b) se muestra a $\mathcal{T}_{1,1}$ como función de ϕ_1 y ϕ_2 a un ω/ω_c dado.

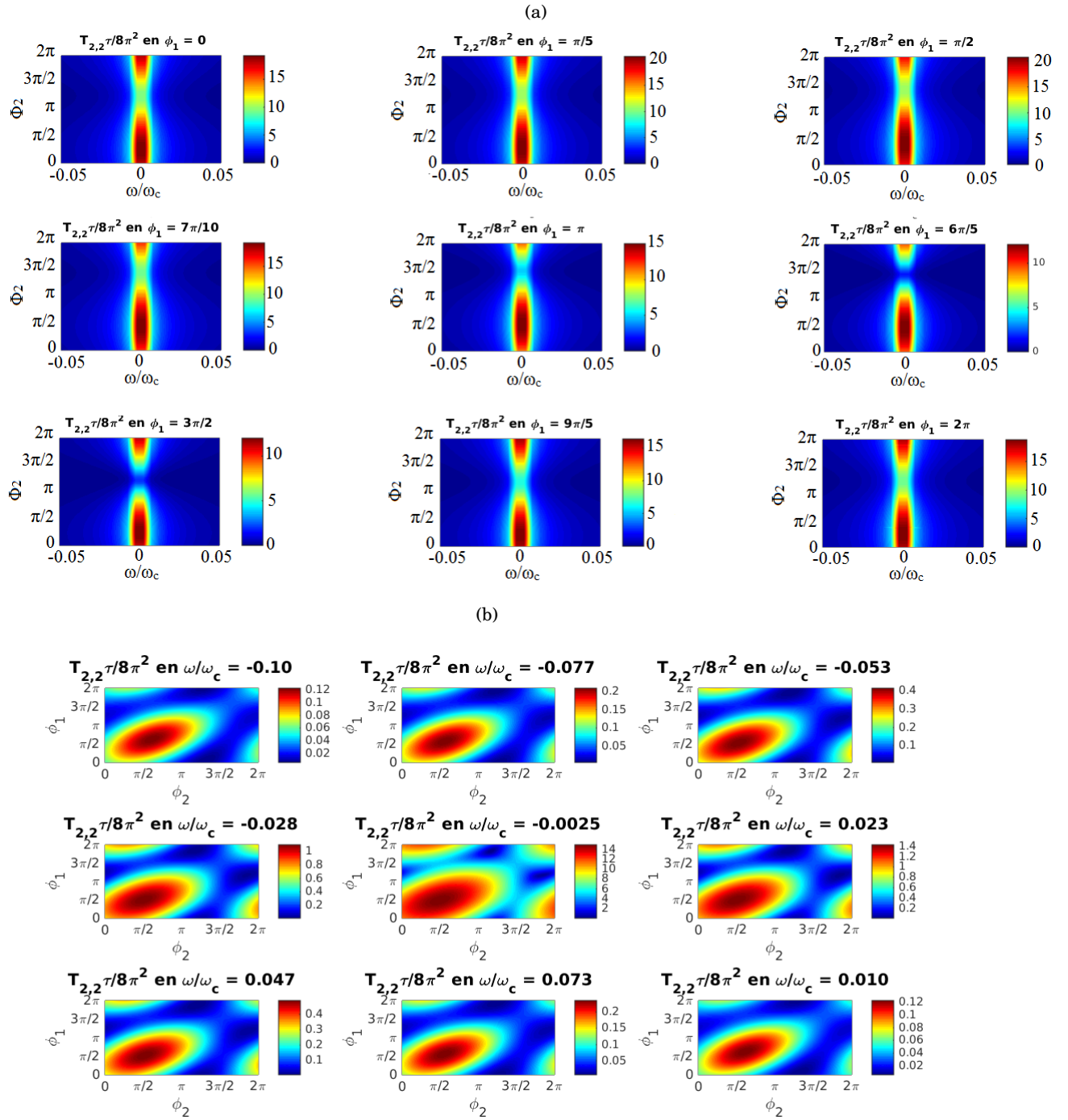


FIGURA A.3. Mapa de color de $\mathcal{T}_{2,2}$ con 5 sitios en la parte central. En la figura A.3(a) se muestra muestra a $\mathcal{T}_{2,2}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c a un ϕ_1 dado. En la figura A.3(b) se muestra a $\mathcal{T}_{2,2}$ como función de ϕ_1 y ϕ_2 a un ω/ω_c dado.

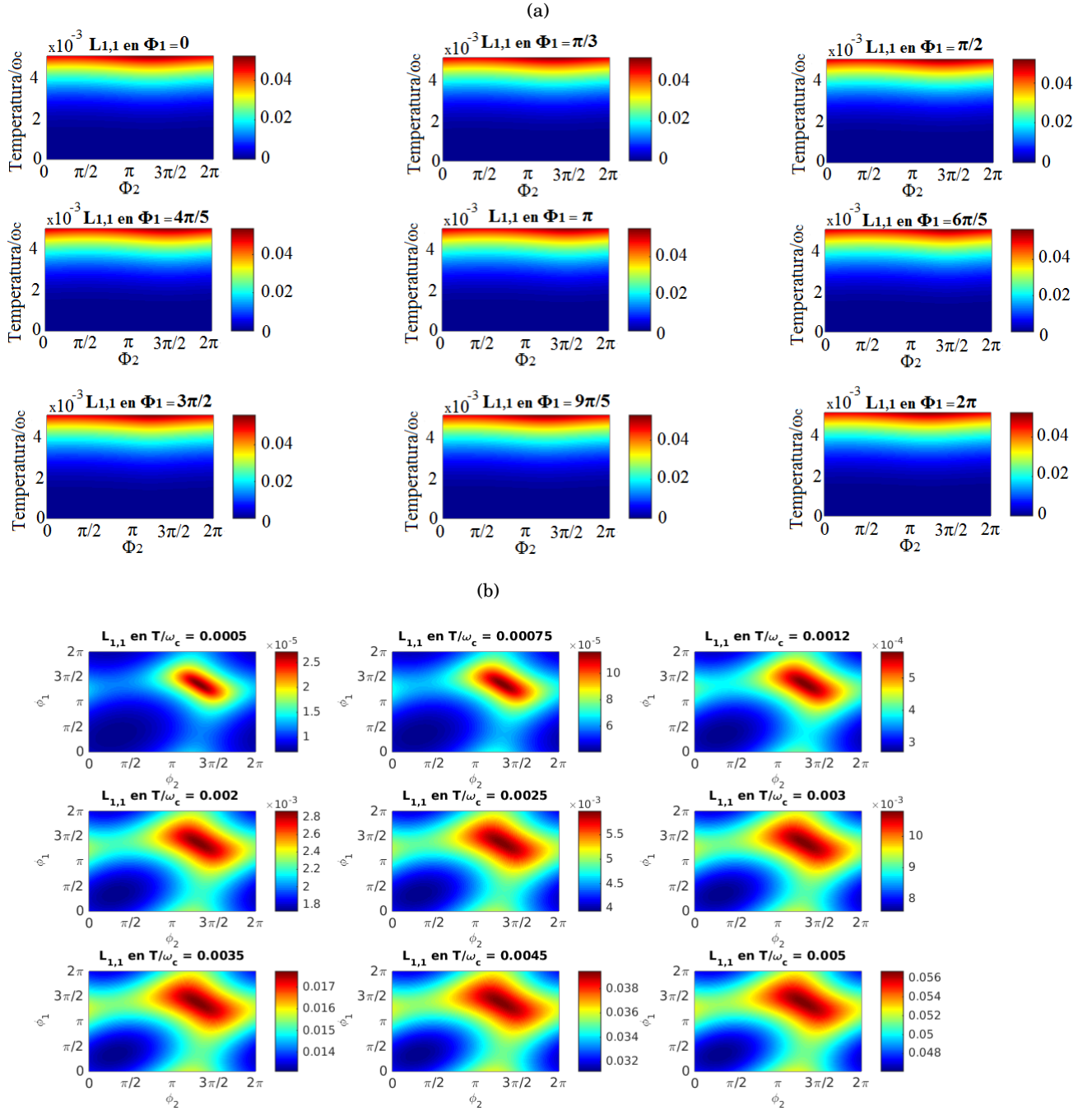


FIGURA A.4. Mapa de color de $L_{1,1}$ con 5 sitios en la parte central. En la figura A.4(a) se muestra muestra a $L_{1,1}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c a un ϕ_1 dado. En la figura A.4(b) se muestra a $L_{1,1}$ como función de ϕ_1 y ϕ_2 a un ω/ω_c dado.

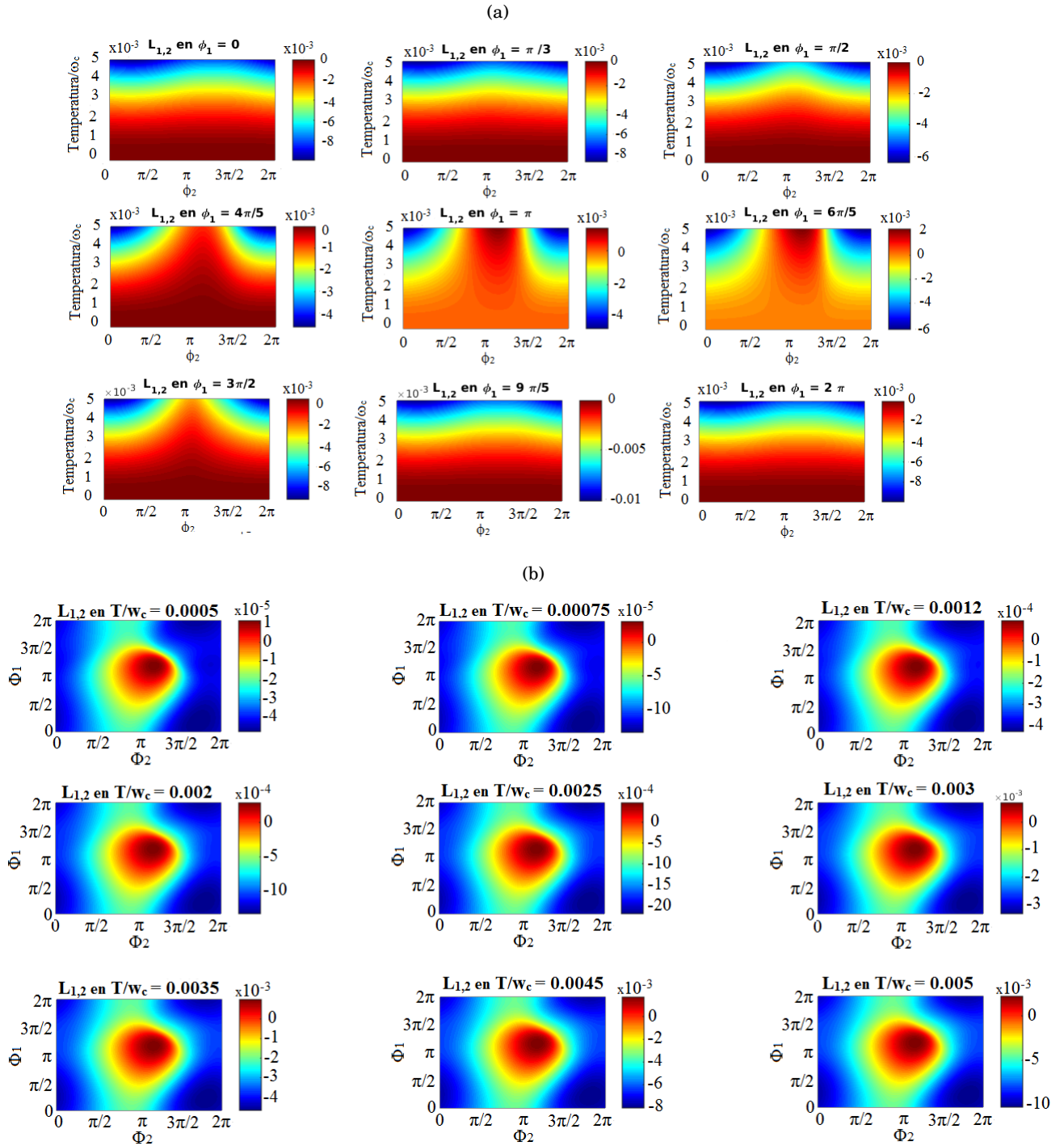


FIGURA A.5. Mapa de color de $L_{1,2}$ con 5 sitios en la parte central. En la figura A.5(a) se muestra muestra a $L_{1,2}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c a un ϕ_1 dado. En la figura A.5(b) se muestra a $L_{1,2}$ como función de ϕ_1 y ϕ_2 a un ω/ω_c dado.

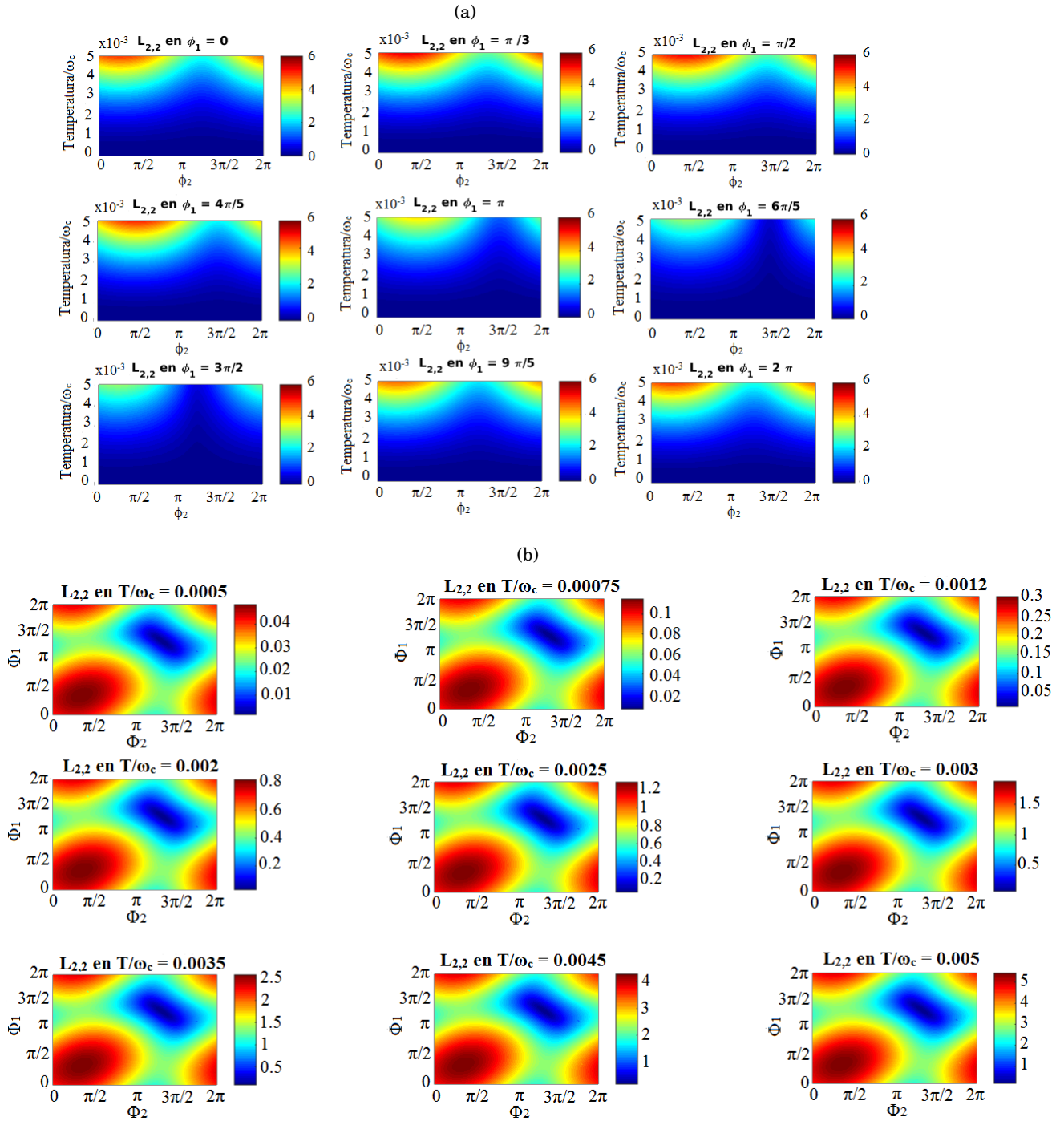


FIGURA A.6. Mapa de color de $L_{2,2}$ con 5 sitios en la parte central. En la figura A.6(a) se muestra muestra a $L_{2,2}$ como función de ϕ_2 y ω/ω_c a un ϕ_1 dado. En la figura A.6(b) se muestra a $L_{2,2}$ como función de ϕ_1 y ϕ_2 a un ω/ω_c dado.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] L. Arrachea and B. Rizzo, “Nonequilibrium green’s functions in the study of heat transport of driven nanomechanical systems,” in *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 427, p. 012012, IOP Publishing, 2013.
- [2] L. Arrachea, E. R. Mucciolo, C. Chamon, and R. B. Capaz, “Microscopic model of a phononic refrigerator,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 12, p. 125424, 2012.
- [3] M. F. Ludovico, F. Battista, F. von Oppen, and L. Arrachea, “Adiabatic response and quantum thermoelectrics for ac-driven quantum systems,” *Physical Review B*, vol. 93, no. 7, p. 075136, 2016.
- [4] M. F. Ludovico, L. Arrachea, M. Moskalets, and D. Sánchez, “Periodic energy transport and entropy production in quantum electronics,” *Entropy*, vol. 18, no. 11, p. 419, 2016.
- [5] L. V. Keldysh *et al.*, “Diagram technique for nonequilibrium processes,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 20, no. 4, pp. 1018–1026, 1965.
- [6] H. Haug, A.-P. Jauho, and M. Cardona, *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*, vol. 2. Springer, 1996.
- [7] E. A. Calzetta and B.-L. Hu, *Nonequilibrium quantum field theory*, vol. 10. Cambridge University Press Cambridge UK, 2008.
- [8] J.-S. Wang, N. Zeng, J. Wang, and C. K. Gan, “Nonequilibrium green’s function method for thermal transport in junctions,” *Physical Review E*, vol. 75, no. 6, p. 061128, 2007.
- [9] M. L. Leek, “Mathematical details in the application of non-equilibrium green’s functions (negf) and quantum kinetic equations (qke) to thermal transport,” *arXiv preprint arXiv:1207.6204*, 2012.
- [10] A. Jauho, “Introduction to the keldysh nonequilibrium green function technique,” *Lect. notes*, vol. 17, 2006.
- [11] L. Arrachea and M. Moskalets, “Energy transport and heat production in quantum engines,” *arXiv preprint arXiv:0903.1153*, 2009.

- [12] M. F. Ludovico, M. Moskalets, D. Sánchez, and L. Arrachea, “Dynamics of energy transport and entropy production in ac-driven quantum electron systems,” *Physical Review B*, vol. 94, no. 3, p. 035436, 2016.
- [13] H. B. Callen, “The application of onsager’s reciprocal relations to thermoelectric, thermomagnetic, and galvanomagnetic effects,” *Physical Review*, vol. 73, no. 11, p. 1349, 1948.
- [14] L. Arrachea, “Green-function approach to transport phenomena in quantum pumps,” *Physical Review B*, vol. 72, no. 12, p. 125349, 2005.
- [15] M. Moskalets and M. Büttiker, “Adiabatic quantum pump in the presence of external ac voltages,” *Physical Review B*, vol. 69, no. 20, p. 205316, 2004.
- [16] M. Moskalets and M. Büttiker, “Dissipation and noise in adiabatic quantum pumps,” *Physical Review B*, vol. 66, no. 3, p. 035306, 2002.
- [17] T. Humphrey, H. Linke, and R. Newbury, “Pumping heat with quantum ratchets,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 11, no. 2, pp. 281–286, 2001.