



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA.

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO  
MATEMÁTICAS POSGRADO EN FÍSICA  
APLICADA.

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS.

POSTGRADO EN CIENCIAS FÍSICA APLICADA.

**Oscilaciones en la densidad  
electrónica de un gas de Lorentz  
bajo la influencia de un campo  
eléctrico**

*Tesis Profesional para obtener el grado de Maestría en Ciencias*

*Presenta*

*Lic. David Oswaldo Romero Quitl*

*Director de Tesis*

*Dr. Miller Toledo Solano*

Puebla, Puebla, 29 de junio del 2016



---

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA.

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO  
MATEMÁTICAS POSGRADO EN FÍSICA  
APLICADA.

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS.

POSTGRADO EN CIENCIAS FÍSICA APLICADA.

**Oscilaciones en la densidad  
electrónica de un gas de Lorentz  
bajo la influencia de un campo  
eléctrico**

*Tesis Profesional para obtener el grado de Maestría en Ciencias*

*Presenta*

*Lic. David Oswaldo Romero Quitl*

*Director de Tesis*

*Dr. Miller Toledo Solano*

Puebla, Puebla, 29 de junio del 2016

---

## AGRADECIMIENTOS

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por darme la oportunidad de estudiar mis estudios de maestría.

Este trabajo no habría sido posible sin el apoyo y el estímulo de mi asesor el Dr. Miller Toledo Solano en la FC-FM de la BUAP y la ayuda del Dr. Alberto Salazar del Instituto de Física de la UNAM. Gracias a ellos se planteó el problema y con su guía llegamos a la resolución de los perfiles de densidad.

Gracias a todos los docentes que me impartieron sus asignaturas fui capaz de realizar mi trabajo en tiempo y forma, además que continuamente resolvían mis dudas y me inspiraban por el camino correcto.

Además por el aliento y ánimo que me brindaron mis padres, mi hermana y toda mi familia, no puedo decir más que muchas gracias. Afortunadamente siempre estuvieron para apoyarme en todo lo que necesitara. Gracias a mi novia por soportarme y entenderme durante la realización de la tesis.

Y finalmente gracias a la institución CONACYT por el apoyo brindado durante el trabajo, el cual fue constante y necesario. Sin el cual este trabajo no habría sido posible.

Gracias a todos por su apoyo.

---

## RESUMEN

El interés en modelos deterministas y caóticos radica en la posibilidad de estudiar la relación existente entre las características macroscópicas de fenómenos irreversibles, como los coeficientes de transporte, con las propiedades dinámicas microscópicas del sistema. Los modelos de billares, que tienen una dinámica que puede ser descrita en términos de mapas de colisiones, han mostrado ser muy útiles en este aspecto. Recientemente, el modelo de estudio ha sido el gas “girante” de Lorentz (GGL). Este es un modelo mecánico microscópico de termo-difusión que se inspira en el gas de Lorentz. Aquí las partículas errantes colisionan con discos dispersores que rotan con alguna velocidad angular intercambiando energía de manera elástica, que lleva al GGL a alcanzar un equilibrio termodinámico local. De esta manera el GGL muestra un comportamiento de transporte totalmente realista sin dejar de ser resoluble exactamente en el nivel de la mecánica estadística de equilibrio. Sin embargo, cuando el GGL se encuentra bajo la influencia de un alto campo eléctrico normalizado, contribuciones más allá del régimen lineal son necesarias.

Esta tesis explora a través de una dinámica molecular del GGL las influencias del campo eléctrico, debido a la importancia que tiene la disipación interna del trabajo hecho por el mismo campo. Se propone un modelo hidrodinámico que toma en cuenta los efectos disipativos en las corrientes de flujo de energía y masa. Este modelo logra explicar las oscilaciones de longitud de onda larga en la densidad de partículas (como función de la coordenada a lo largo del canal), que se atribuyen al acoplamiento entre el transporte del calor y la materia comúnmente encontrados en sistemas reales. Además, logra explicar los perfiles de la temperatura para el gas de partículas que se mueven en el canal con discos dispersores. Por otro lado, pequeñas oscilaciones en la densidad de partículas alrededor de cada disco dispersor, se atribuyen al movimiento resonante provocado por el campo, la longitud del canal y por la densidad de discos dispersores. Estas vibraciones son soluciones típicas de un péndulo paramétrico. Se determinan los parámetros del sistema que juegan el rol fundamental para determinar las zonas de estabilidad en la densidad de partículas a lo largo del canal.

---

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>9</b>
<b>1. El Gas de Lorentz</b>	<b>11</b>
1.1. Gas de Lorentz periódico . . . . .	11
1.2. GGL y su Simulación . . . . .	13
<b>2. Modelo lineal y Simulación</b>	<b>17</b>
2.1. Relaciones de Onsager . . . . .	17
2.2. Comparación . . . . .	19
<b>3. Oscilaciones en el GGL</b>	<b>23</b>
3.1. Perfiles de la Simulación . . . . .	23
3.2. Modelo hidrodinámico (Envolvente) . . . . .	30
3.3. Péndulo Paramétrico . . . . .	33
<b>Conclusiones</b>	<b>45</b>
<b>A. Programa Fortran</b>	<b>47</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>51</b>



# Introducción

El problema del movimiento de una partícula cargada en un medio dispersor bajo la influencia de un campo eléctrico uniforme fue resuelto por Hendrik Lorentz [1]. A inicios del siglo XX Paul Drude desarrolló un modelo que reproducía los resultados básicos de la teoría cualitativa para la conducción eléctrica en los metales [2]. Sin embargo, Lorentz, en su modelo hizo la suposición de que los electrones sufren una dispersión elástica (no disipación) por lo que éstos ganan constantemente energía cinética conforme se aceleran en el campo y no pueden dar lugar a una función de distribución de velocidades asintótica estacionaria. Este dilema motivó investigaciones sobre el gas de Lorentz, en las cuales algunas formas de disipación fueron explícitamente incorporadas [3–6], y la ley de Ohm fue obtenida. En la ausencia de disipación, Piasecki y Wajnryb [7] reconocen las ausencias fundamentales que se originan de la no estacionariedad del sistema. Por otro lado, las ecuaciones fenomenológicas de la termodinámica irreversible, que describen la difusión, la conducción de calor, y la viscosidad entre una multitud de otros fenómenos, son de gran importancia en muchos campos. Enlazar estos fenómenos a la dinámica microscópica subyacente es, sin embargo, altamente no trivial y hasta ahora los resultados no han sido concluyentes. En este sentido, un modelo de gas de Lorentz con colisiones inelásticas fue usado, para estudiar transporte de calor en un canal cuasi-dimensional colocado entre dos reservorios térmicos a diferentes temperaturas [8]. Mientras los resultados fueron consistentes con alguna especie de transporte de energía difusivo, la identificación con la ley de Fourier no fue encontrada [9], dado que este sistema no satisface el equilibrio térmico local (ETL), suposición fundamental de la termodinámica irreversible.

En el modelo del gas “girante” de Lorentz (GGL), inspirado en el gas de Lorentz descrito, las partículas errantes colisionan con discos dispersores (que giran con alguna velocidad angular) intercambian energía de manera elástica y esto provoca que el GGL alcance un equilibrio termodinámico local. Este modelo ha sido importante para la comprensión de algunas las propiedades físicas significativas de los materiales [10–13], por ejemplo, en el GGL muestra un aumento en la eficiencia termoeléctrica considerable [12]. En ese trabajo los coeficientes de transporte en el régimen de respuesta lineal, que caracterizan el flujo de calor y de materia, son finitos en el límite termodinámico. Sin embargo, los

dos flujos no son trivialmente acoplados. Aún cuando se ha mostrado que bajo a un campo eléctrico aplicado causa la misma corriente como la que correspondería a un gradiente de potencial químico [11] (en primer orden del campo aplicado), discrepancias visibles en altos ordenes del campo son esperadas en los cálculos numéricos.

Pocos trabajos son encontrados en la literatura con altos ordenes en el campo y una teoría que explique dichas discrepancias no existe. Dada la importancia que tiene la disipación interna del trabajo hecho por el campo, esta tesis explora la influencia de un campo eléctrico uniforme de magnitud  $E$ . A través de una dinámica molecular en el GGL, se observan los perfiles tanto de la temperatura como de la densidad de partículas a lo largo del canal. En particular, se estudian las oscilaciones para la densidad alrededor de cada disco dispersor, en dependencia de la distancia del canal, la distancia entre los discos y del campo eléctrico aplicado.

Esta tesis se divide en tres Capítulos y una sección de conclusiones. En el primer Capítulo se hace una revisión de la literatura respecto a la teoría del modelo del GGL. Además, se analiza el modelo de red triangular y sus límites entre los horizontes “*finito*” e “*infinito*”, y se describe el programa de simulación usado para obtener los resultados numéricos del GGL.

En el segundo Capítulo se analizan las ecuaciones de Onsager y los coeficientes de transporte, mismos que caracterizan el flujo de calor y la materia, ambos no trivialmente acoplados. Se obtienen las expresiones exactas de todos los coeficientes de transporte y de los flujos. Se muestra que el régimen de respuesta lineal no es suficiente para explicar las discrepancias visibles, entre en los perfiles de la temperatura y densidad obtenidos en este régimen y aquellos obtenidos por la simulación.

El tercer Capítulo contiene en una mayor profundidad, y originalidad, la propuesta de un modelo hidrodinámico que toma en cuenta los efectos disipativos del calor de Joule en los flujos de energía y masa. Dicho modelo explica en buena manera el perfil de la temperatura promedio, así como las oscilaciones de onda larga en la densidad promedio a lo largo del canal. Sin embargo, el acoplamiento entre el transporte del calor y la materia comúnmente encontrados en sistemas reales, en nuestro caso, se ven manifestados por las pequeñas vibraciones de la densidad promedio alrededor de cada disco dispersor. Estas vibraciones son soluciones típicas de un péndulo paramétrico. De esta manera se determinan los parámetros del sistema que juegan el rol fundamental para determinar las zonas de estabilidad en la densidad de partículas a lo largo del canal.

Finalmente, se presenta un resumen de las conclusiones principales de la tesis.

# Capítulo 1

## El Gas de Lorentz

A inicios del siglo XX, Paul Drude desarrolló una teoría cualitativa para la conducción eléctrica en los metales. Para establecer una base más sólida para la teoría de Drude, Hendrik Lorentz [14] sugirió un modelo idealizado de este transporte de electrones en la que: (i) las interacciones electrón-electrón se ignoran, (ii) los átomos de fondo se tratan como dispersores esféricos inmóviles, y (iii) la interacción electrón-átomo se describe mediante dispersión elástica. La suposición (ii) es crucial, ya que convierte un problema de muchos cuerpos en un sistema de una sola partícula eficaz que consiste en una partícula “prueba” y un fondo estático. El modelo de Lorentz representa una fuente poco común de resultados exactos en la teoría cinética, que proporciona un ejemplo concreto donde la reversibilidad microscópica puede conciliarse con la irreversibilidad macroscópica, y revela una variedad de propiedades inesperadas. Este modelo es lo suficientemente simple para ser susceptible de estudios analíticos rigurosos [15–20]. En este capítulo se analiza el modelo de red triangular, se definen los límites de los horizontes “*finito*” e “*infinito*”, y se hace una descripción general del modelo del GGL.

### 1.1. Gas de Lorentz periódico

El modelo dinámico molecular más simple es aquel que toma en cuenta las suposiciones descritas por Lorentz, antes mencionadas. En este modelo y cuando se usan condiciones límites periódicas, el momento se conserva entre colisiones por lo que una partícula simple se mueve trivialmente con velocidad constante. La consideración de que la interacción sea de esfera dura, al menos dos discos duros moviéndose en dos dimensiones bajo condiciones límites periódicas, es suficiente para regresar a una dinámica trivial [21]. Es decir, si se supone que no hay arrastre (no movimiento del centro de masa) y únicamente se considera el movimiento relativo, entonces el problema de dos discos duros es equivalente al movimiento

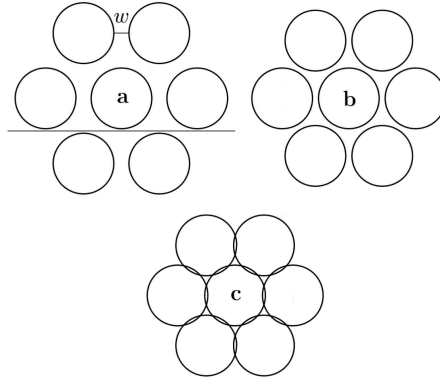


Figura 1.1: Gas de Lorentz periódico con red hexagonal. Los dispersores tienen radio unitario. Existen 3 regímenes dependiendo del espacio  $w$ . (a) Horizonte infinito,  $w > 4/\sqrt{3} - 2$ . (b) Horizonte finito  $0 < w < 4/\sqrt{3} - 2$ . (c) Traslape  $\sqrt{3} - 2 < w < 0$ .

de una partícula puntual colisionando con un disco del doble de su radio original, con condiciones límites periódicas o, en equivalencia, con una red periódica de tales dispersores. Este modelo descrito es lo que se conoce como el gas de Lorentz periódico.

Existen tres regímenes en el gas de Lorentz periódico, dependiendo de la forma de la celda periódica y el tamaño de los discos duros ver Fig. 1.1. Ya que la reducción a las coordenadas relativas tiene el efecto de doblar el radio, es posible para los discos se traslapen en el caso reducido, y entonces conduzcan a un escenario atrapado donde no hay difusión. Cuando los discos no se traslapan, para una celda hexagonal es posible tener un cota superior en el tiempo entre colisiones, y el gas de Lorentz se dice que tiene horizonte “*finito*”, y hay difusión normal definida por  $\langle x^2 \rangle \sim t$  [22]. Para celdas cuadradas, rectangulares, y tridimensionales, los discos no se traslapan y se dice que la celda tiene horizonte “*infinito*”. Esto conduce a una difusión anómala de la forma  $\langle x^2 \rangle \sim t \ln t$  [20].

El tamaño de  $w$  está relacionado con la densidad de los discos  $n$  dado por el área entre los círculos de la red y el triángulo formado por los centros de los discos dispersores. En la Fig. 1.2 el espacio entre los centros de los discos es de  $2 + w$ , donde  $w$  es la distancia entre los discos dispersores. Por lo que podemos llegar a la siguiente relación Ec. (1.1).

$$n = 2/[\sqrt{3}(2 + w)^2], \quad (1.1)$$

el valor de  $w_c = 0.3094$  denota el tamaño de la brecha, entre los horizontes “*finito*” e “*infinito*”.

La celda periódica en dos dimensiones es frecuentemente cuadrada, rectangular

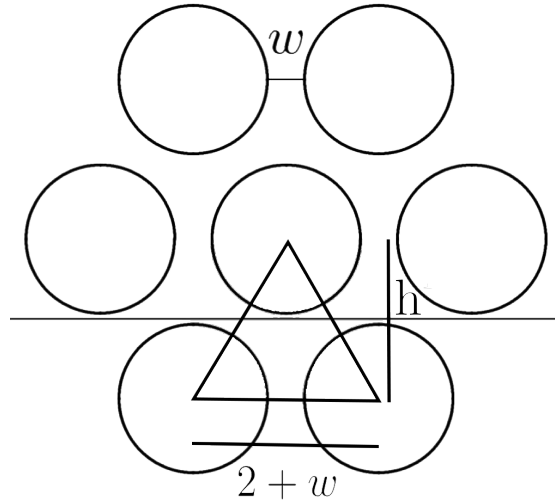


Figura 1.2: El mínimo  $h$  para que estar en el horizonte finito e infinito, se requiere  $h = 2$ , considerando que la distancia entre los centros de los discos es  $2 + w$ . Entonces  $h = \sin(\frac{\pi}{3})(2 + w) = \frac{\sqrt{3}}{2}(2 + w)$ . Por lo que la densidad de discos dispersores esta dado por la Ec. 1.1.

o hexagonal. En cada uno de estos casos, el gas de Lorentz es dinámicamente equivalente a un billar finito de la misma forma, tamaño y con paredes límites duras. Esto se debe a que un billar con reflexiones en los límites puede extenderse reflejando los dominios a través de cada límite recto. Así el gas de Lorentz con una celda periódica cuadrada es equivalente al billar de Sinai [23], el cual contiene un dispersor circular en el centro de un billar cuadrado.

En el gas de Lorentz se puede inducir un estado estacionario fuera del equilibrio imponiendo condiciones de flujo en los bordes, esto puede lograrse acoplado reservorios estocásticos de partículas puntuales en los bordes del billar [24]. La diferencia entre los potenciales químicos de los reservorios se traduce en un gradiente de densidad a través del sistema, por lo que se genera una corriente dada por la ley de difusión de Fick.

## 1.2. GGL y su Simulación

Recientemente, el modelo de estudio ha sido el gas “*girante*” de Lorentz (GGL) [10,11] ver Fig. 1.3, el cual es un modelo mecánico microscópico de termodifusión que se inspira en el gas de Lorentz. Las partículas errantes de masa  $m = 1$  y carga  $e = 1$ , colisionan con los discos dispersores que rotan con alguna velocidad angular y cuyos radios tienen tamaños  $R = 1$ . En este modelo se supone que las

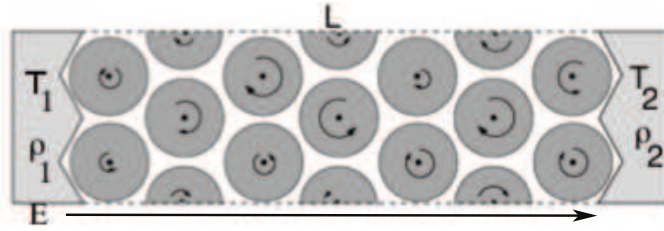


Figura 1.3: Ilustración esquemática de la geometría de los dispersores que están dispuestos en un arreglo triangular con horizonte finito para evitar trayectorias infinitas [11]. Los centros de los dispersores se encuentran fijos sobre una red de triángulos, a lo largo del canal con condiciones límites periódicas a lo largo de la dirección vertical. El sistema que consideramos es abierto ya que el canal está conectado a reservorios con densidades fijas  $\rho_1$ ,  $\rho_2$  y temperaturas fijas  $T_1$  y  $T_2$ , respectivamente.

partículas intercambian energía de manera elástica con los dispersores y el sistema GGL alcanza un equilibrio termodinámico local [11].

El GGL muestra un comportamiento de transporte totalmente realista sin dejar de ser resoluble exactamente en el nivel de la mecánica estadística de equilibrio [10]. Al imponer los gradientes en la temperatura y potencial químico, se alcanza un estado estacionario y para el cual el equilibrio térmico se sostiene para valores bajos de los gradientes impuestos. El transporte en este sistema es normal en el sentido de que los coeficientes de transporte, que caracterizan el flujo de calor y la materia, son finitos en el límite termodinámico. Sin embargo, los dos flujos no son trivialmente acoplados, tal como se puede observar en [12], donde se propone al GGL para incrementar la eficiencia termoeléctrica en sistemas de billares. En ese trabajo, se encontraron expresiones exactas de todos los coeficientes de transporte en el régimen de respuesta lineal. Aún cuando se ha mostrado que un campo eléctrico aplicado causa la misma corriente, como la que correspondería a un gradiente de potencial químico, en un primer orden del campo aplicado [11], discrepancias visibles en altos ordenes del campo son observadas en los cálculos numéricos.

Estos cálculos numéricos se obtienen simulando una red triangular de discos dispersores, con energía  $\frac{mR\omega^2}{2}$ , con partículas que interactúan con los dispersores en forma de choques elásticos, estas partículas tienen posiciones aleatorias dentro del canal. Después, el sistema se deja evolucionar, resolviendo las ecuaciones de Newton considerando que el momento lineal y la energía cinética se conserva en cada interacción.

A su vez, las partículas son redirigidas al inicio del canal cuando estas llegan al final e igualmente cuando llegan a los bordes superior e inferior de este, para así reproducir una red periódica infinita. Este sistema se encuentra bajo la influencia

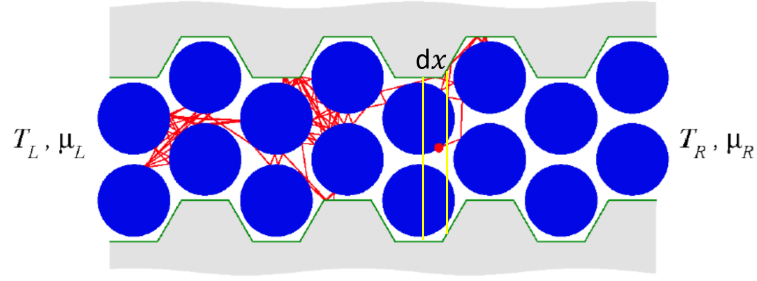


Figura 1.4: Ilustración esquemática de las divisiones  $dx$  lo largo del canal y de la trayectoria típica de una partícula dentro de este [13].

del campo eléctrico (normalizado a  $E = k_B T_0 / L$ ) durante un periodo de tiempo  $\tau$  hasta que las mediciones de los flujos de calor  $\mathcal{J}_q$  y de partículas  $\mathcal{J}_e$  sean constantes (caso estacionario). Una vez en este estado se mide la densidad y temperatura, primero se divide el canal en secciones verticales  $dx$  (Fig. 1.4) y se cuenta la cantidad de partículas en el área entre los discos dispersores  $n(x)$  y su energía  $\mathbb{E}$  (donde  $E_i(t)$  es la suma de la energía cinética, la potencial y la de los discos dispersores), de esta forma se puede calcular la densidad  $\rho$  y temperatura  $T$  como:

$$n(x)dx = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \sum_{i=1}^N \delta[x - x_i(t)] dt dx, \quad (1.2a)$$

$$\mathbb{E}(x)dx = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \sum_{i=1}^N E_i(t) \delta[x - x_i(t)] dt dx, \quad (1.2b)$$

$$\rho(x) = \int n(x) dx, \quad (1.2c)$$

$$T(x) = \frac{\int \mathbb{E}(x) dx}{\rho(x)}. \quad (1.2d)$$

Este código ha sido diseñado para medir la distribución de probabilidad de la velocidad de las partículas. Las mediciones fueron realizadas estroboscópicamente<sup>1</sup> para las partículas que se encontraban en un bloque de cierta anchura en medio del canal ( $x_{lim}$ ). Para aquellas partículas que se encuentran a una distancia  $x_{lim}$  de los discos, se calcula su movimiento de forma más fina, por lo que se evita contar partículas dentro de los discos dispersores.

Así, estas consideraciones son ampliamente usadas para programas de fenómenos de conducción termoeléctrica por [10–13], donde las cantidades como  $T_0$  y  $\mathbb{E}$  tienen valores arbitrarios y normalizados, es por esto que de aquí en adelante

<sup>1</sup>El movimiento continuo de las partículas es simulado de forma discreta

los valores numéricos de  $T(x)$ ,  $\rho(x)$  y  $E$  son una representación de sus valores con unidades. Además, durante este trabajo se enfocó en el comportamiento de los perfiles de  $\rho(x)$  y  $T(x)$  dependiente de las proporciones entre  $L$ ,  $E$  y  $w$  mas no en su equivalente en unidades reales, ya que para cada caso real se tendrían que comparar estos parámetros. En el Apéndice A se muestra parte de las subrutinas que crean la estructura y que muestran la dinámica en el programa.

# Capítulo 2

## Modelo lineal y Simulación

Dentro del régimen de respuesta lineal, donde los efectos disipativos son despreciados, y a partir de las ecuaciones para los flujos de energía y densidad de partículas, se encuentran los perfiles promedios tanto de la temperatura como de la densidad de partículas a lo largo del canal. Se muestra que para altos campos eléctricos, este régimen es incapaz de explicar el comportamiento dichos perfiles obtenidos por simulación de dinámica molecular.

### 2.1. Relaciones de Onsager

En el régimen de respuesta lineal, las ecuaciones de transporte para los flujos de partículas y de calor son  $\mathcal{J}_e$  y  $\mathcal{J}_q$ , respectivamente. Para un material termoeléctrico están sujetas a un gradiente de temperatura  $\partial_x T$  y a un gradiente de potencial químico  $\partial_x \bar{\mu}$ ,

$$\mathcal{J}_e = -\sigma S \partial_x T - \sigma \partial_x \bar{\mu} / e, \quad (2.1a)$$

$$\mathcal{J}_q = -k' \partial_x T - T \sigma S \partial_x \bar{\mu}, \quad (2.1b)$$

donde  $k'$  es la conductividad térmica sin el efecto Seebeck,  $\sigma$  conductividad eléctrica,  $S$  coeficiente del efecto Seebeck y  $\bar{\mu}$  potencial electroquímico. A partir de las relaciones Ecs. (2.1) se calculan los flujos de densidad de electrones  $\mathcal{J}_\rho$  y de energía  $\mathcal{J}_u$  (con la ecuación de balance de la entropía para sistemas abiertos) como:

$$\mathcal{J}_\rho = J_e / e, \quad (2.2a)$$

$$\mathcal{J}_u = J_q + \bar{\mu} J_\rho. \quad (2.2b)$$

Estos flujos relacionan a  $\mathcal{J}_\rho$  y  $\mathcal{J}_u$  con los gradientes de  $\partial_x T$  y  $\partial_x \bar{\mu}$  de forma no trivial, donde el potencial electroquímico  $\bar{\mu}$  es la suma de una parte química y otra eléctrica  $\bar{\mu} = \mu + \mu_e$ , con  $\mu = T \ln(\rho/T)$  el potencial químico de las partículas [29],  $e$  la carga de las partículas,  $E = -\partial_x \phi$  el campo externo y  $\mu_e = e\phi$ .

## Capítulo 2. Modelo lineal y Simulación 2.1. Relaciones de Onsager

De las Ecs. (2.1) se obtienen las relaciones fenomenológicas usuales, si el gradiente de temperatura se desvanece ( $\partial_x T = 0$ ) entonces  $\mathcal{J}_e = -\sigma \partial_x \phi = \sigma E$  ya que para un sistema homogéneo isotérmico  $\mu$  es uniforme, y si  $\mathcal{J}_e = 0$  entonces se obtiene la definición del coeficiente de Seebeck  $\partial_x \bar{\mu} = -eS \partial_x T$ , finalmente se obtiene la definición común de  $\mathcal{J}_q$  como  $\mathcal{J}_q = -k \partial_x T$  con  $k = k' - T\sigma S^2$ , por lo que las Ecs. (2.2) se expanden a:

$$\mathcal{J}_\rho = -\frac{\sigma S}{e} \partial_x T - \frac{\sigma}{e^2} \partial_x \bar{\mu}, \quad (2.3a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_u &= -k \partial_x T + \bar{\mu} \left( -\frac{\sigma S}{e} \partial_x T - \frac{\sigma}{e^2} \partial_x \bar{\mu} \right) \\ &= \left( -k - \bar{\mu} \frac{\sigma S}{e} \right) \partial_x T - \bar{\mu} \frac{\sigma}{e^2} \partial_x \bar{\mu}. \end{aligned} \quad (2.3b)$$

Dado a que en el régimen lineal, los efectos disipativos (como el efecto Joule) respecto al campo pueden ser despreciados, los procesos de termo-difusión y termoelectricidad son equivalentes. Las ecuaciones de termoelectricidad (2.3) pueden ser comparadas con las ecuaciones de transporte de termo-difusión, donde las corrientes de densidad de partículas  $\mathcal{J}_\rho$  y energía  $\mathcal{J}_u$ , en primer orden de las fuerzas termodinámicas, pueden ser representadas en términos de la matriz de Onsager  $\mathbf{L}$ :

$$\mathcal{J}_\rho = L_{\rho u} \partial_x \left( \frac{1}{T} \right) + L_{\rho\rho} \partial_x \left( \frac{-\bar{\mu}}{T} \right), \quad (2.4a)$$

$$\mathcal{J}_u = L_{uu} \partial_x \left( \frac{1}{T} \right) + L_{u\rho} \partial_x \left( \frac{-\bar{\mu}}{T} \right). \quad (2.4b)$$

Expandiendo Ecs. (2.4) en términos de  $\partial_x T$  y  $\partial_x \bar{\mu}$  obtenemos:

$$\mathcal{J}_\rho = \left( L_{\rho\rho} \frac{\bar{\mu}}{T^2} - \frac{1}{T} L_{\rho u} \right) \partial_x T - L_{\rho\rho} \frac{1}{T} \partial_x \bar{\mu}, \quad (2.5a)$$

$$\mathcal{J}_u = \left( L_{u\rho} \frac{\bar{\mu}}{T^2} - L_{uu} \frac{1}{T^2} \right) \partial_x T - L_{u\rho} \frac{1}{T} \partial_x \bar{\mu}. \quad (2.5b)$$

En ausencia de campo magnético la reciprocidad de Onsager resulta en simetría para  $\mathbf{L}$  ( $L_{\rho u} = L_{u\rho}$ ). Comparando los coeficientes de las Ecs. (2.3) y (2.5), se pueden obtener los coeficientes experimentales respecto a los valores de los elementos de  $\mathbf{L}$ , por lo que se obtienen los coeficientes de la termoelectricidad en términos de los de termo-difusión:

$$\sigma = \frac{e^2}{T} L_{\rho\rho}, \quad (2.6a)$$

$$k = \frac{\det \mathbf{L}}{T^2 L_{\rho\rho}}, \quad (2.6b)$$

$$S = \frac{1}{eT} \left( \frac{L_{u\rho}}{L_{\rho\rho}} - \bar{\mu} \right). \quad (2.6c)$$

## 2.2. Comparación

Gracias a que en la sección anterior se probó que la teoría de termoelectricidad y termo-difusión son equivalentes en este sistema, ahora es posible usar las corrientes instantáneas microscópicas. De esta manera un gas ergódico de partículas neutras no interactuantes, con masa  $m$  en un contenedor  $d$ -dimensional, fue considerado en [12] para estudiar un gas diluido en estado de no-equilibrio en un canal de billar caótico, conectado a través de dos reservorios con  $\rho$  y  $T$  fijos. Al integrar  $J_u$  sobre la energía en la apropiada distribución canónica, se obtiene la proporción de las partículas inyectadas en el canal  $\gamma$ , escrita como

$$\gamma = \frac{\lambda}{(2\pi m)^{1/2}} \rho T^{1/2}. \quad (2.7)$$

El valor de  $\gamma$  esta relacionado con  $\mu$  en un gas con  $D$  grados de libertad como:

$$\mu = T \ln \left[ \frac{C_D \gamma}{T^{(D+1)/2}} \right], \quad (2.8)$$

donde  $C_D$  es una constante dependiente de  $D$ . La proporción de energía inyectada desde los reservorios viene dado como  $\epsilon = \gamma T (D+1)/2$ . Si  $p_t(l)$  es la probabilidad de transmisión de un canal de longitud  $l$ , como consecuencia tenemos que los valores de  $J_\rho$  y  $J_u$  dependen de la diferencia de las proporciones de  $\epsilon$  y  $\gamma$  en el lado izquierdo  $i$  y derecho  $d$  del canal

$$J_\rho = p_t(l)(\gamma_i - \gamma_d), \quad (2.9a)$$

$$J_u = p_t(l)(\epsilon_i - \epsilon_d). \quad (2.9b)$$

Finalmente utilizando a  $\epsilon$  en las Ecs. (2.9) y usando la Ec. (2.8) para eliminar  $\gamma$  en favor de  $\mu$ :

$$J_\rho = -\frac{\lambda p_t(l) l}{2\pi m)^{1/2}} \partial_x [T^{(D+1)/2} e^{\mu/T}], \quad (2.10a)$$

$$J_u = -\frac{\lambda p_t(l) l}{2\pi m)^{1/2}} \frac{D+1}{2} \partial_x [T^{(D+3)/2} e^{\mu/T}]. \quad (2.10b)$$

Aplicando estos resultados de [12] a nuestro caso para  $D = 2$ , con la consideración de que la contribución del campo externo se encuentra en el cambio del potencial electroquímico como en [11], se tiene que

$$J_\rho = -A \partial_x (T^{3/2} e^{\mu/T}), \quad (2.11a)$$

$$J_u = -A\partial_x \left( \frac{3}{2}T^{5/2}e^{\mu/T} \right). \quad (2.11b)$$

donde  $A = \frac{\lambda p_i(l)l}{2\pi m)^{1/2}}$ . Tomando en cuenta que  $\partial e^{\mu/T} = e^{\mu/T} \partial \frac{\bar{\mu}}{T}$  las ecuaciones anteriores pueden reescribirse como

$$J_\rho = -A\frac{3}{2}T^{1/2}e^{\mu/T}\partial_x T - AT^{3/2}e^{\mu/T}\partial_x \left( \frac{\bar{\mu}}{T} \right), \quad (2.12a)$$

$$J_u = -A\frac{3}{2}\frac{5}{2}T^{3/2}e^{\mu/T}\partial_x T - A\frac{3}{2}T^{5/2}e^{\mu/T}\partial_x \left( \frac{\bar{\mu}}{T} \right). \quad (2.12b)$$

Considerando que  $e^{\mu/T} = \rho/T$  y simplificando las Ecs. (2.12):

$$J_\rho = -\frac{3}{2}A\frac{\rho}{\sqrt{T}}\partial_x T - A\sqrt{T}\rho\partial_x \left( \frac{\bar{\mu}}{T} \right), \quad (2.13a)$$

$$J_u = -\frac{15}{4}A\sqrt{T}\rho\partial_x T - A\frac{3}{2}T^{3/2}\rho\partial_x \left( \frac{\bar{\mu}}{T} \right). \quad (2.13b)$$

Usando que  $\partial_x \left( \frac{\bar{\mu}}{T} \right)$  se refiere al potencial electroquímico, se llega a:

$$\begin{aligned} \partial_x \left( \frac{\bar{\mu}}{T} \right) &= \partial_x \left[ \ln \left( \frac{\rho}{T} \right) + \frac{e\phi}{T} \right] \\ &= \frac{T}{\rho} \partial_x \left( \frac{\rho}{T} \right) - \left( \frac{eE}{T} + \frac{e\phi}{T^2} \partial_x T \right) \\ &= \frac{\partial_x \rho}{\rho} - \frac{\partial_x T}{T} - \frac{e}{T^2} (ET + \phi \partial_x T). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Sustituyendo el valor de la Ec. (2.14) en las Ecs. (2.13), encontramos:

$$J_\rho = -\frac{3}{2}A\frac{\rho}{\sqrt{T}}\partial_x T - A\sqrt{T}\rho \left[ \frac{\partial_x \rho}{\rho} - \frac{\partial_x T}{T} - \frac{e}{T^2} (ET + \phi \partial_x T) \right], \quad (2.15a)$$

$$J_u = -\frac{15}{4}A\sqrt{T}\rho\partial_x T - A\frac{3}{2}T^{3/2}\rho \left[ \frac{\partial_x \rho}{\rho} - \frac{\partial_x T}{T} - \frac{e}{T^2} (ET + \phi \partial_x T) \right]. \quad (2.15b)$$

Simplificando las Ecs. (2.15):

$$-\frac{J_\rho}{A} = \left( \frac{1}{2} - \frac{e\phi}{T} \right) \frac{\rho}{\sqrt{T}} \partial_x T + \sqrt{T} \partial_x \rho - \frac{\rho}{\sqrt{T}} eE, \quad (2.16a)$$

$$-\frac{2J_u}{3A} = \left( \frac{3}{2} - \frac{e\phi}{T} \right) \rho \sqrt{T} \partial_x T + \sqrt{T} T \partial_x \rho - \rho \sqrt{T} eE. \quad (2.16b)$$

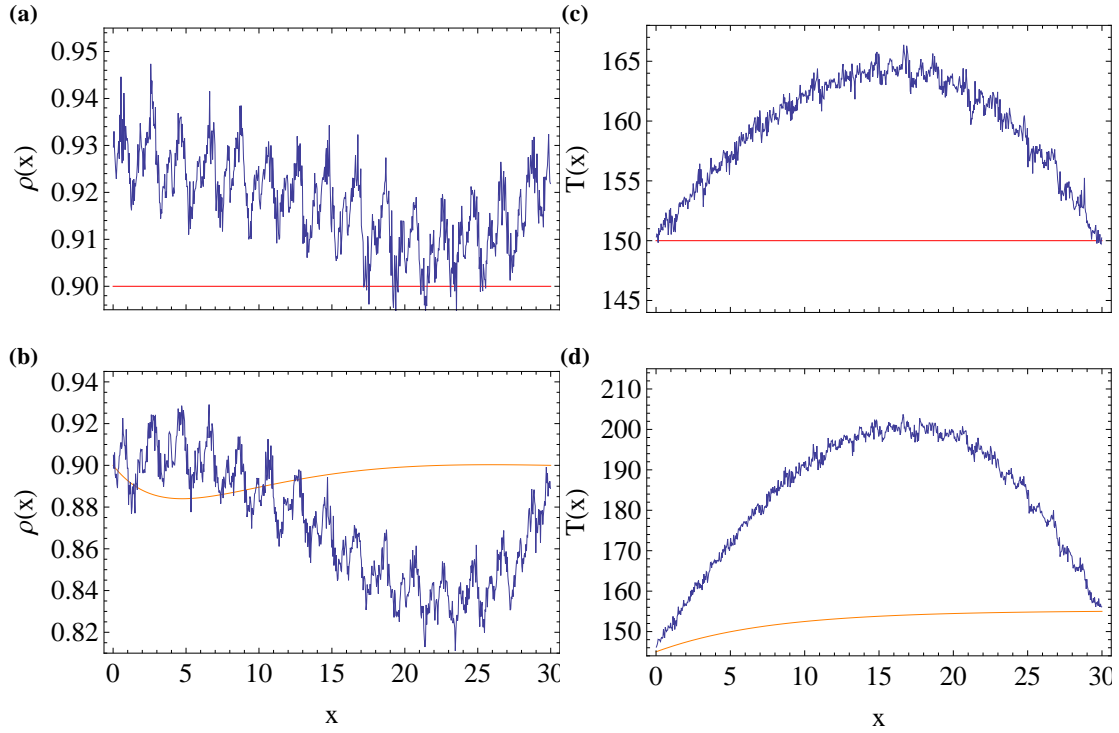


Figura 2.1: Perfiles de la densidad (a) y (b). De la temperatura (c) y (d), las gráficas se obtienen al resolver las Ecs. 2.17 cuando  $E = 2k_B T_0/L$ ,  $L = 30$  y  $\rho_0 = \rho_1 = \rho_2 = 0.9$ . Para los perfiles rojos  $T_0 = T_1 = T_2 = 150$  ((a) y (c)). Mientras las gráficas naranjas se obtienen con  $T_1 = 145$  y  $T_2 = 155$  ((b) y (d)). Los perfiles azules son los de la simulación del GGL con las mismas condiciones.

Ahora en el caso estacionario el gradiente de las corrientes  $J_\rho$  y  $J_u$  es cero, lo que implica las Ecs. (2.17) considerando a  $A$  constante para cada experimento.

$$\partial_x \left( -\frac{J_\rho}{A} \right) = \partial_x \left[ \left( \frac{1}{2} - \frac{e\phi}{T} \right) \frac{\rho}{\sqrt{T}} \partial_x T + \sqrt{T} \partial_x \rho - \frac{\rho}{\sqrt{T}} eE \right] = 0, \quad (2.17a)$$

$$\partial_x \left( -\frac{2J_u}{3A} \right) = \partial_x \left[ \left( \frac{3}{2} - \frac{e\phi}{T} \right) \rho \sqrt{T} \partial_x T + \sqrt{T} T \partial_x \rho - \rho \sqrt{T} eE \right] = 0. \quad (2.17b)$$

Dado que se tiene un sistema de ecuaciones no lineales acopladas con condiciones a la frontera, el método de disparo (“shooting method”) se convierte en el método más oportuno para conocer las funciones  $\rho(x)$  y  $T(x)$ , usando como parámetros de entrada algunos valores de  $\rho$  y  $T$ , respectivamente. Usando un programa numérico desarrollado para el método de disparo fue posible conocer estas funciones. Para los valores fijos en las fronteras  $T_1 = T_2 = T_0 = 150$  y  $\rho_1 = \rho_2 = \rho_0 = 0.90$  con un campo de  $E = 2k_B T_0/L$ , las soluciones a las Ecs. (2.17) son mostradas en la Fig. 2.1 de color rojo. Se observa que incluso variando  $E$ ,

el comportamiento de los perfiles tanto para la temperatura como para la densidad no cambian a lo largo del canal. La explicación a esta discrepancia entre los perfiles descritos por el modelo lineal en las relaciones de Onsager y el resultado numérico, se debe a que estas ecuaciones no toman en cuenta los efectos disipativos en las corrientes de flujo de energía y masa (tal como el efecto Joule) bajo la influencia de un alto campo eléctrico normalizado.

Por otro lado, la Fig. 2.2 muestra los perfiles  $T(x)$  y  $\rho(x)$  cuando existen condiciones diferentes en la frontera de  $T$  ( $T_1 = 145$  y  $T_2 = 155$ ) con valores muy distintos de campo  $E$ . Se muestra que el comportamiento de los perfiles no se acerca al mostrado como resultado de la simulación del GGL que se muestra en la Fig. 2.1.

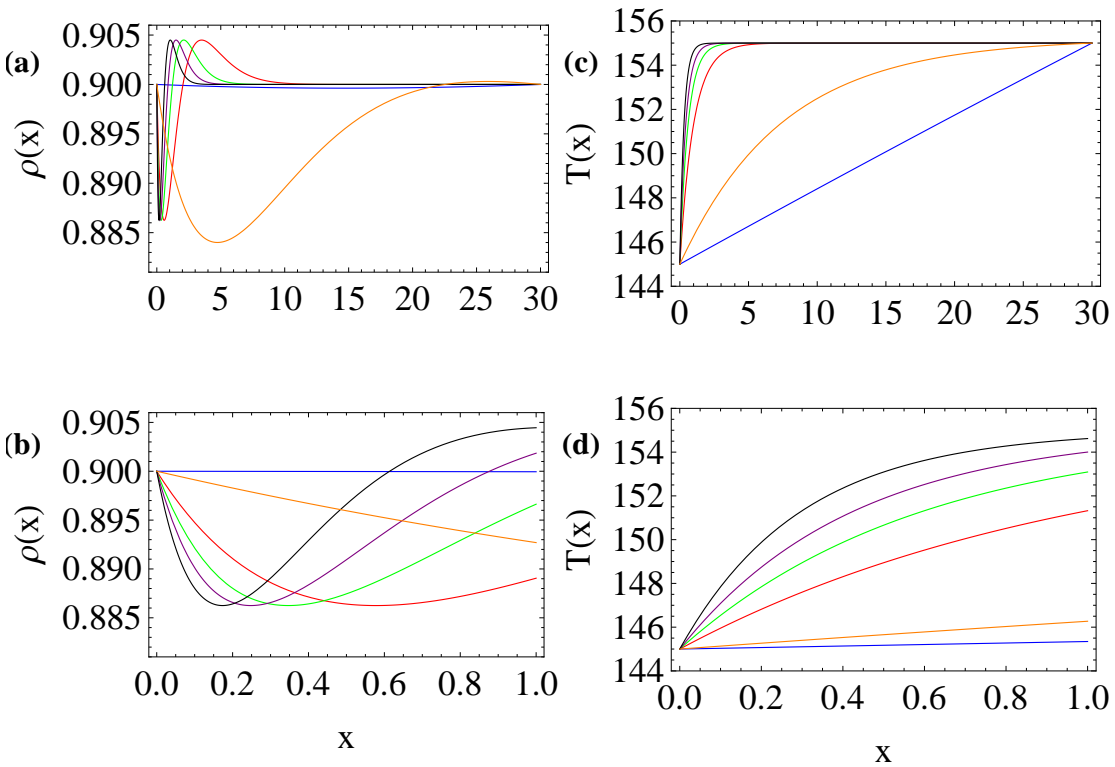


Figura 2.2: Perfiles de la densidad (a) y (b). De la temperatura (c) y (d). Al resolver las Ecs. 2.17 cuando  $L = 30$ ,  $\rho_0 = \rho_1 = \rho_2 = 0.9$ ,  $T_1 = 145$  y  $T_2 = 155$ . Con un acercamiento a  $x \in \{0, 1\}$  para un mejor detalle.  $E = 0$  (azul),  $E = 2k_B T_0/L$  (naranja),  $E = 30k_B T_0/L$  (rojo),  $E = 50k_B T_0/L$  (verde),  $E = 70k_B T_0/L$  (morado) y  $E = 100k_B T_0/L$  (negro)

# Capítulo 3

## Oscilaciones en el GGL

Mediante simulaciones de dinámica molecular del GGL bajo la influencia de un campo eléctrico espacialmente uniforme de magnitud  $E$ , este capítulo se muestra que la temperatura dentro del sistema se incrementa debido a la disipación interna del trabajo hecho por el campo. Este efecto es bien conocido como calentamiento de Joule. Un perfil de la temperatura encontrado desde la simulación numérica puede observarse en [11]. Nosotros suponemos que para valores del campo eléctrico  $E > k_B T_0/L$  ( $T_0 = T_1 = T_2$ ), existen oscilaciones en la densidad de partículas alrededor de cada disco dispersor (como función de la coordenada a lo largo del canal), así como oscilaciones de longitud de onda larga de la misma, las cuales deberían ser atribuidas al acoplamiento entre el transporte del calor y la materia comúnmente encontrados en sistemas reales. Las pequeñas oscilaciones alrededor de cada disco dispersor pueden ser descritas por la ecuación de Mathieu.

### 3.1. Perfiles de la Simulación

Mediante el programa de simulación escrito en el lenguaje de Fortran, se pudo simular el GGL en una red triangular con los valores fijos de frontera de la temperatura  $T_1 = T_2 = T_0 = 150$  y de  $\rho_1 = \rho_2 = \rho_0 = 0.93$ . Con esto se pudo observar el cambio del comportamiento de  $\rho$  y  $T$  para los campos  $E = 2, 3$  y  $4 E_0$ , donde  $E_0 = k_B T_0/L$ . Los valores de las distancias de los discos fueron  $w = 0.9w_c, 1w_c$  y  $1.1w_c$  y finalmente variando a  $L$  con  $L = 20, 30, 40$  y  $50$ .

Para visualizar los resultados obtenidos, primero se mostrarán los perfiles de temperatura Fig. 3.2 y densidad Fig. 3.1 manteniendo fijo a  $L = 30$  pero cambiando a  $E$  y  $w$  (con el objetivo de ejemplificar el comportamiento general de variar  $w$  en distintos  $E$ ). Después se mostrarán los resultados en las Figs. 3.3 y 3.4 para  $L = 30$  y  $w = 1w_c$  pero variando a  $E$  para mostrar de una forma más clara su efecto. Finalmente se presenta en las Figs. 3.5 y 3.6 los perfiles de densidad a  $w = 1w_c$  y  $E = 2$  constantes y distintos  $L$ .

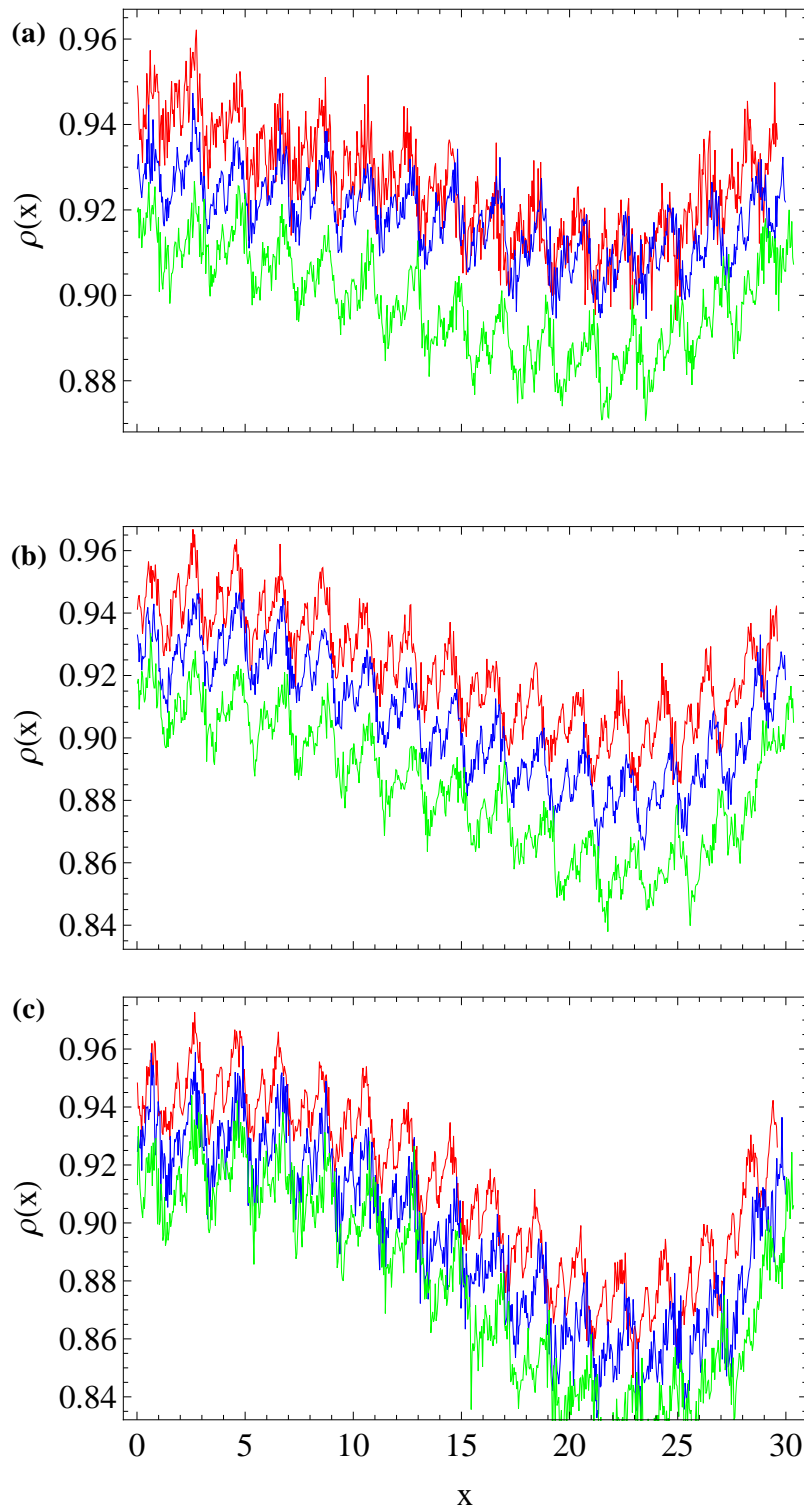


Figura 3.1: Perfiles de la densidad en el GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c). Denotando a  $w = 0.9w_c$  con rojo,  $w = w_c$  con azul y  $w = 1.1w_c$  con verde (con las condiciones de frontera ya fijadas).

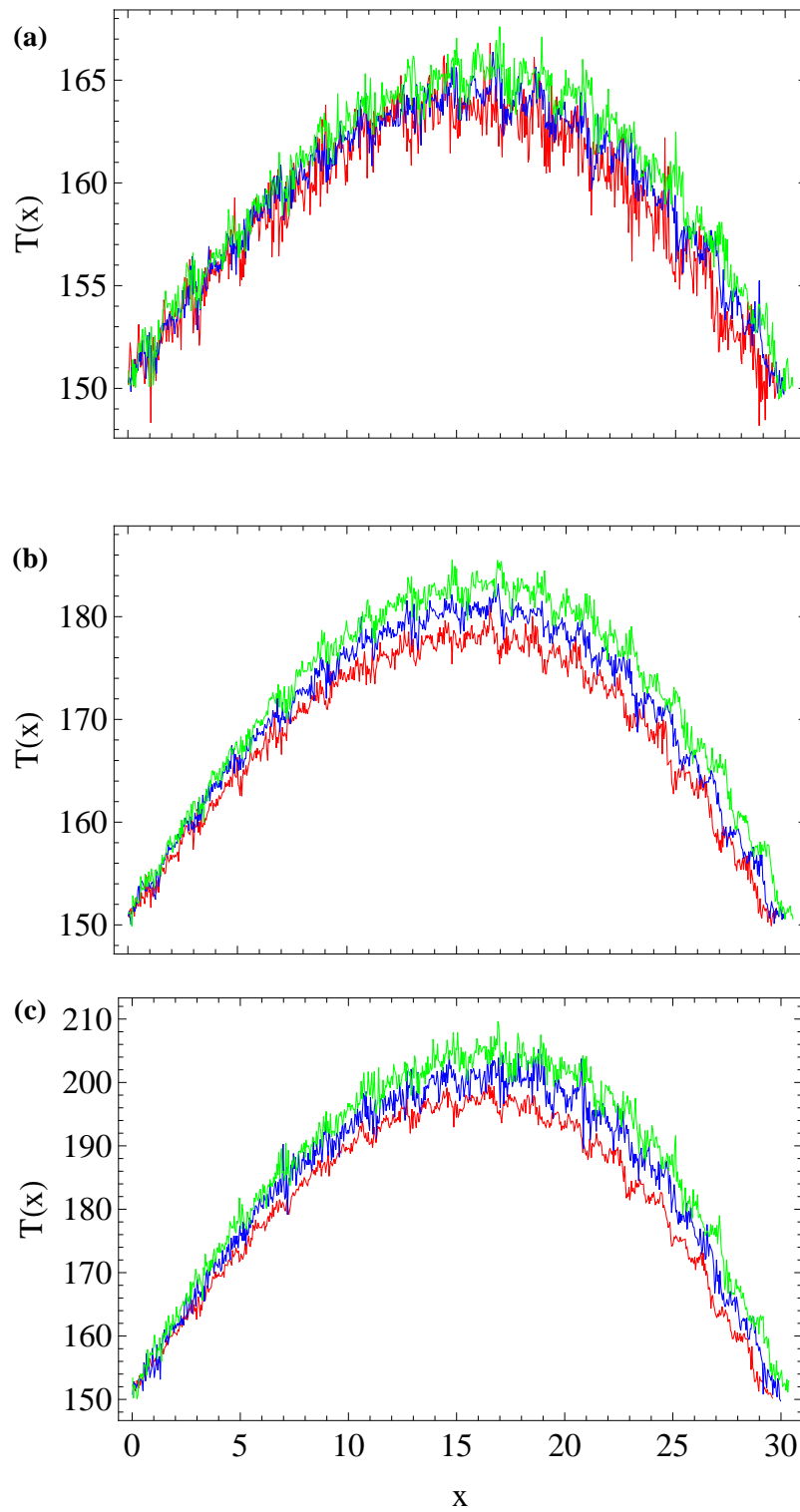


Figura 3.2: Perfiles de la temperatura en el GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c). Denotando a  $w = 0.9w_c$  con rojo,  $w = w_c$  con azul y  $w = 1.1w_c$  con verde (con las condiciones de frontera ya fijadas).

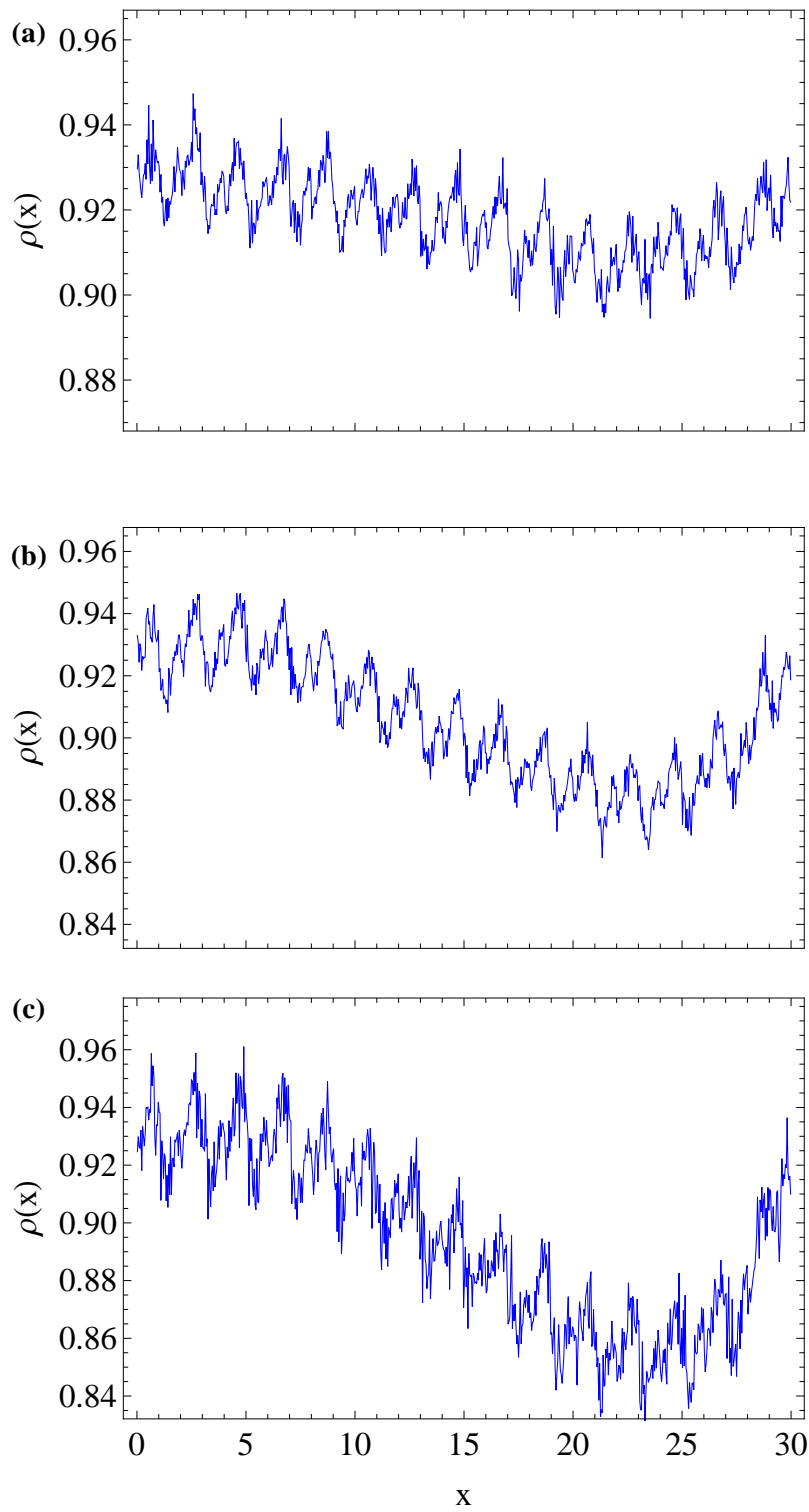


Figura 3.3: Perfiles de la densidad en el GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c).

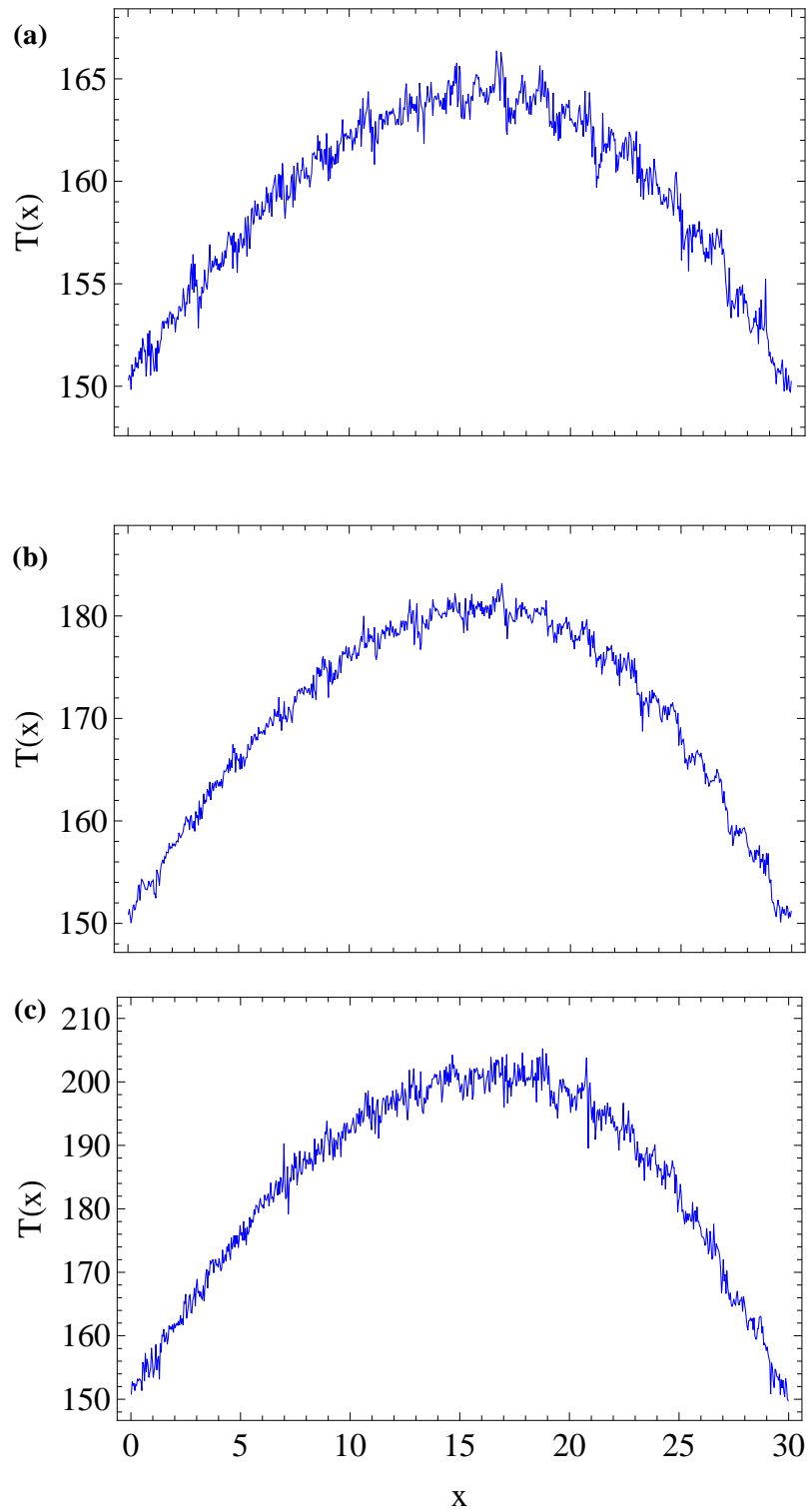


Figura 3.4: Perfiles de la temperatura en el GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c).

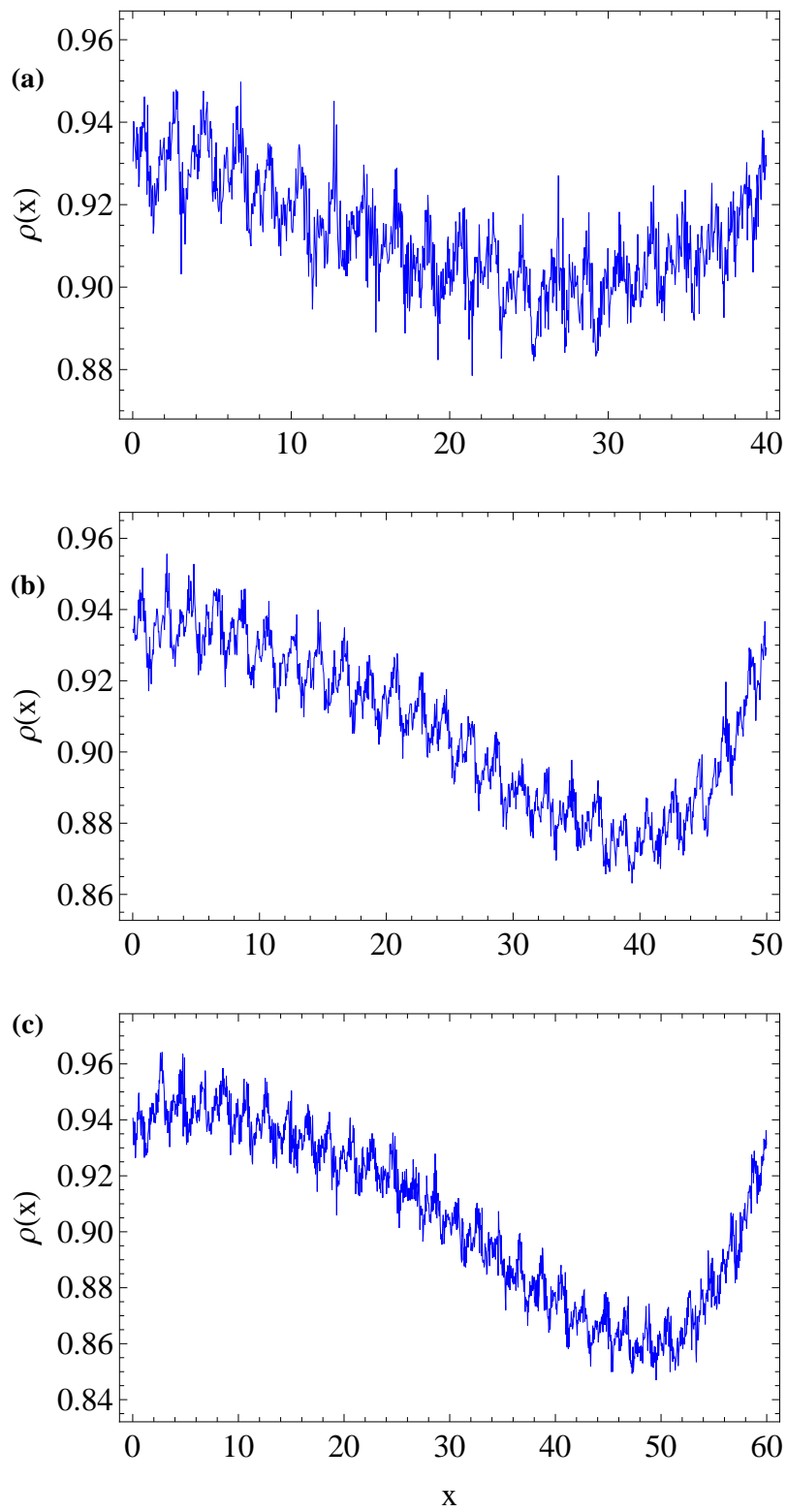


Figura 3.5: Perfiles de la densidad en el GGL cuando  $L = 40$  (a),  $L = 50$  (b) y  $L = 60$  (c).

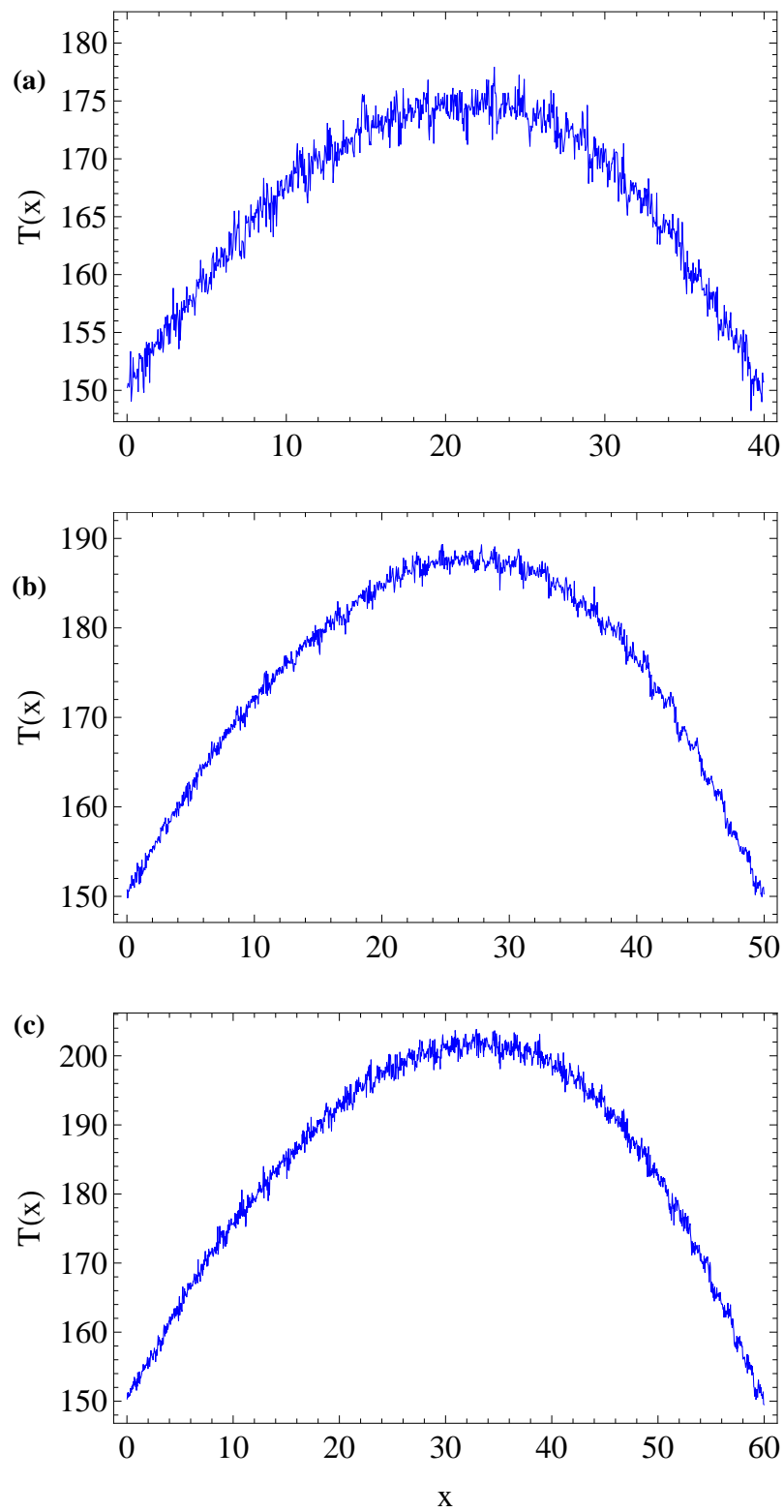


Figura 3.6: Perfiles de la temperatura en el GGL cuando  $L = 40$  (a),  $L = 50$  (b) y  $L = 60$  (c).

## 3.2. Modelo hidrodinámico (Envolvente)

Como se ha discutido en el capítulo 2, la teoría de termoelectricidad es insuficiente para explicar los resultados numéricos obtenidos en campos de mayor orden. Nosotros proponemos un modelo simple que explica el perfil de la densidad en dos partes. En esta sección se propone la función envolvente de la densidad a lo largo del canal basada en un modelo hidrodinámico.

La razón principal de dividir el modelo en dos partes, es debido a que como se muestra en las Figs. 3.3 y 3.4 (donde se indican los perfiles de la densidad y temperatura para  $E = 2, 3$  y  $4$  respectivamente), se observan oscilaciones de onda larga en el perfil de la densidad de partículas.

Las funciones envolventes del comportamiento oscilatorio tanto en la densidad como en la temperatura, se deben al proceso de dispersión de las partículas por los discos al ser constantemente aceleradas por el campo eléctrico  $E$ , estas funciones envolventes pueden ser ajustados desde una descripción hidrodinámica para las corrientes de flujo de corriente  $\mathcal{J}_\rho$  y flujo de calor  $\mathcal{J}_q$  como se muestra en las Ecs 3.1

$$\mathcal{J}_\rho = -D\partial_x\rho + v\rho_0, \quad (3.1a)$$

$$\mathcal{J}_q = -\kappa\partial_x T, \quad (3.1b)$$

donde  $D$  es una constante de difusión,  $v$  la velocidad terminal de arrastre y  $\kappa$  la conductividad térmica usual. De la ecuación de balance para sistemas abiertos [29], el flujo de corriente de energía  $\mathcal{J}_u$  se relaciona a los flujos anteriores como:

$$\mathcal{J}_u = \mathcal{J}_q + \bar{\mu}\mathcal{J}_\rho, \quad (3.2)$$

donde el potencial electroquímico es  $\bar{\mu} = \mu + e\phi$ ,  $\mu = T\ln(\rho/T)$  es el potencial químico en campo cero [12] y  $\phi$  es el potencial eléctrico. De [12], donde se trata el caso con  $E = 0$ , se estima que  $\kappa \propto \rho\sqrt{T}$ . Estudios recientes en el gas de red de Lorentz [25], donde el campo puede tomar valores altos, es decir,  $E > k_B T_0/L$ , se ha observado que la movilidad se presenta como

$$v = (1 - n)v_0, \quad (3.3)$$

con  $v_0 = D\frac{E}{k_B T}$  la velocidad de arrastre en una red libre de impurezas y  $n$  está asociado a la densidad del número de discos Ec. (1.1). Nosotros tomamos  $\rho_0$  como la densidad de partículas cuando la densidad del número de discos es nula  $n = 0$ .

Cuando el campo está presente junto con la red de discos, la densidad de partículas se puede aproximar con  $\rho \sim \rho_0/(1 - n)$ , mismo que puede escribirse como:

$$\rho/\rho_0 \sim \frac{1}{1 - n} = \sum_{i=0}^{\infty} n^i, \quad (3.4)$$

con  $n$  representando la probabilidad de salir de la trampa generada por los dispersores en el  $i$  proceso de dispersión. En el caso  $n \ll 1$ , se puede escribir como:

$$1 - n \sim (2 - \rho/\rho_0). \quad (3.5)$$

En este caso se puede reescribir el termino  $v\rho_0$  de (3.1.a) como

$$v\rho_0 = D \frac{E}{k_B T} (2\rho_0 - \rho), \quad (3.6)$$

donde consideramos  $D = \text{cte}$ . Las Ecs. (3.1.a) y (3.2) se expandan en:

$$\mathcal{J}_\rho = -D\partial_x\rho + \frac{DE}{k_B T} (2\rho_0 - \rho), \quad (3.7a)$$

$$\mathcal{J}_u = -\kappa\partial_x T + \bar{\mu}D \left[ -\partial_x\rho + \frac{E}{k_B T} (2\rho_0 - \rho) \right]. \quad (3.7b)$$

En nuestro caso estacionario, las ecuaciones de continuidad para el flujo de corriente y energía Ecs. (3.7) implican las Ecs. (3.8).

$$\partial_x \mathcal{J}_\rho = 0, \quad (3.8a)$$

$$\partial_x \mathcal{J}_u = \partial_x \mathcal{J}_q + (\partial_x \bar{\mu}) \mathcal{J}_\rho = 0. \quad (3.8b)$$

donde justamente el término  $(\partial_x \bar{\mu}) \mathcal{J}_\rho$  incorpora el calor de Joule en el sistema.

Para desarrollar las Ecs. (3.8), primero se expandira a  $\partial_x \bar{\mu}$ , considerando el potencial electroquímico  $\bar{\mu} = T \ln(\rho/T) + e\phi$ , obteniendo:

$$\begin{aligned} \partial_x \bar{\mu} &= \partial_x T \ln\left(\frac{\rho}{T}\right) + \frac{T^2}{\rho} \partial_x \left(\frac{\rho}{T}\right) - eE, \\ &= \left[ \ln\left(\frac{\rho}{T}\right) - 1 \right] \partial_x T + \frac{T}{\rho} \partial_x \rho - eE. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Usando las Ecs. (3.7) y Ec. (3.9) sobre la Ec. (3.8), obtenemos:

$$D\partial_x \left[ -\partial_x\rho + \frac{E}{k_B T} (2\rho_0 - \rho) \right] = 0, \quad (3.10a)$$

$$\begin{aligned} \partial_x \mathcal{J}_u &= -\kappa\partial_x^2 T + \\ D\partial_x \left\{ \left[ \ln\left(\frac{\rho}{T}\right) - 1 \right] \partial_x T + \frac{T}{\rho} \partial_x \rho - eE \right\} &\left[ -\partial_x\rho + \frac{E}{k_B T} (2\rho_0 - \rho) \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.10b)$$

Considerando que  $\kappa = D\rho\sqrt{T}$ ,  $K_B = 1$  y  $e = 1$  entonces las Ecs. (3.10) se reducen a:

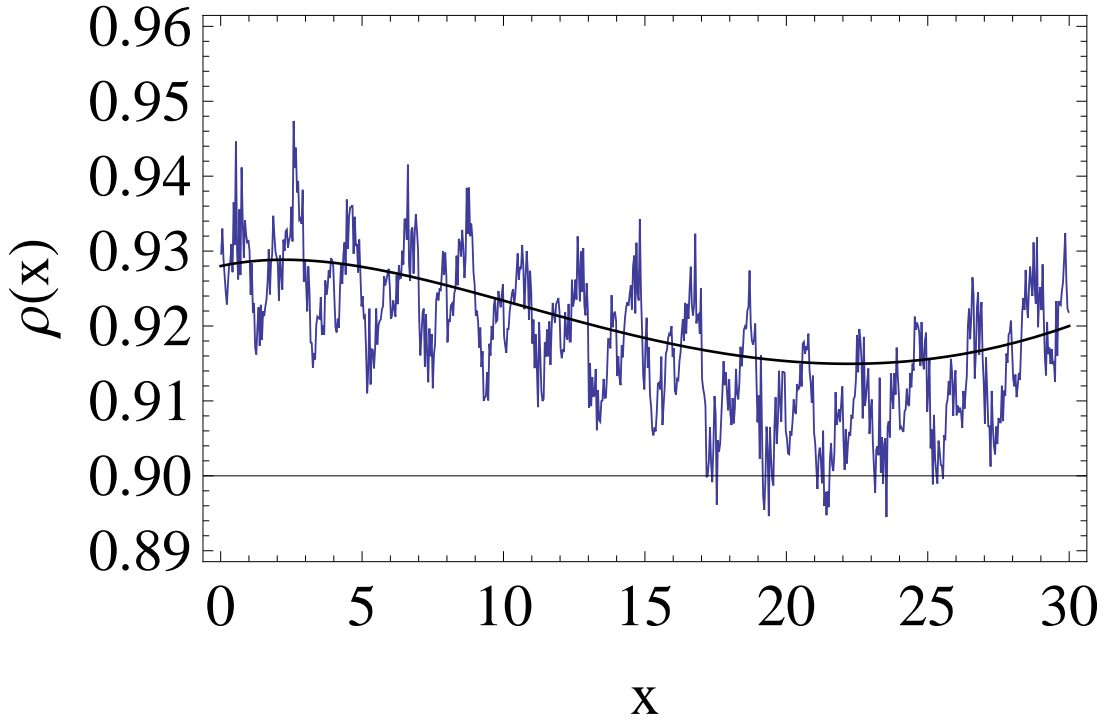


Figura 3.7: Perfil de la densidad en el canal cuando  $E = 2$ . La línea sólida azul muestran los datos de simulación mientras que la función negra es la envolvente  $\rho_e$ .

$$-\partial_x^2 \rho - \frac{2\rho_0 E}{T^2} \partial_x T + \frac{\rho E}{T^2} \partial_x T - \frac{E}{T} \partial_x \rho = 0, \quad (3.11a)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2T\rho} \left\{ -2T \partial_x \rho (T \partial_x \rho - 2\rho_0 E) \right. \\ & -2\rho \left\{ 2\rho_0 E^2 + \partial_x T \left[ -2\rho_0 E \left( \ln \frac{\rho}{T} - 1 \right) \right] \right. \\ & \left. \left. + T^{3/2} \partial_x \rho + T \left( \ln \frac{\rho}{T} - 1 \right) \partial_x \rho \right\} + \rho^2 \left[ -2E \left( \ln \frac{\rho}{T} - 1 \right) \right] \partial_x T \right. \\ & \left. - \sqrt{T} \partial_x^2 T + 2(E^2 - T^{3/2} \partial_x^2 T) \right\} = 0. \end{aligned} \quad (3.11b)$$

Simplificando las Ecs. (3.11), obtendremos un sistema de ecuaciones diferenciales parciales acopladas de  $\rho$  y  $T$ , la solución de la densidad obtenida de este par de relaciones Ecs. (3.12) se señala en la Fig. 3.7, que desde ahora llamamos  $\rho_e$  donde el subíndice  $e$  denota el valor promedio de la densidad (la envolvente), que

satisface las Ecs. (3.8). Finalmente obtenemos las Ecs. (3.12).

$$\rho_e''(x) + P(x)\rho_e'(x) + Q(x)\rho_e(x) = R(x), \quad (3.12a)$$

$$T''(x)F(x) + G(x)T'(x) + H(x)T(x) = 0, \quad (3.12b)$$

con

$$P(x) = \frac{E}{T(x)}, \quad Q(x) = -\frac{E}{T^2(x)}T'(x), \quad R(x) = -2\frac{\rho_0 E}{T^2(x)}T'(x), \quad (3.13)$$

$$F(x) = -\sqrt{T(x)}[1 + 2T(x)], \quad G(x) = 2\rho_e(x)E \left\{ \ln \left[ \frac{\rho_e(x)}{T(x)} \right] - 1 \right\} (2\rho_0 - \rho_e(x)),$$

$$H[T(x), x] = 4\rho_e'(x)\rho_0 E - 2T(x)\rho_e'^2(x) - 2T(x)^{3/2}\rho_e(x)\rho_e'(x)$$

$$-2\rho_e'(x)\rho_e(x)T(x) \left\{ \ln \left[ \frac{\rho_e(x)}{T(x)} \right] - 1 \right\} + 2E^2 [1 - 2\rho_e(x)\rho_0].$$

Una vez más para resolver este par de ecuaciones acopladas con condiciones a la frontera, se usó el método de disparo donde los valores en las fronteras son los mismos, es decir,  $T_1 = T_2$  y  $\rho_1 = \rho_2$ . Así es como se logro obtener el valor envolvente de la densidad que se muestra en la Fig. 3.7.

### 3.3. Péndulo Paramétrico

Los fenómenos oscilatorios en la naturaleza generalmente producen patrones espaciales o temporales que se pueden entender de manera teórica desde el marco de trabajo de las resonancias paramétricas. Un ejemplo de esto es el péndulo paramétrico. Este es un modelo en numerosas aplicaciones en ingeniería, incluyendo estructuras marinas [26], y ha sido uno de los sistemas más comunes en la literatura para ilustrar la dinámica de un oscilador no lineal. Entre sus diversas respuestas, puntos de equilibrio, oscilaciones, rotaciones así como el caos pueden ser observados. Debido al proceso de dispersión de las partículas, por los discos al ser constantemente aceleradas por el campo eléctrico  $E$ , junto con la simetría de la red, las pequeñas oscilaciones en la densidad electrónica promedio alrededor de cada disco dispersor, se pueden se modelar como soluciones típicas de un péndulo paramétrico [27]. Después de un ajuste numérico, la densidad promedio de partículas a lo largo de canal, en el caso  $\omega = \omega_c$ , puede escribirse como

$$\rho(x) = \rho_e(x) + \rho_p(x), \quad (3.14a)$$

$$\rho_p(x) = A [\text{sen}(\omega x) + \text{sen}(2\omega x + \phi)]. \quad (3.14b)$$

donde la cantidad fluctuante  $\rho_p(x)$  tiene la forma de solución típica del péndulo paramétrico. Aquí  $A$  es la amplitud de la oscilación,  $\omega = \pi$  la frecuencia de los discos en el canal y  $\phi = \pi/2$  una constante. Para mostrar que  $\rho_p(x)$  puede tener la forma de la solución de un péndulo paramétrico, es necesario obtener su ecuación diferencial, la cual puede escribirse como

$$\rho_p''(x) - 2\omega \operatorname{sen}(\omega x) \rho_p'(x) + \omega^2 [5 + 4 \cos(\omega x)] \rho_p(x) = 0. \quad (3.15)$$

Esta ecuación tiene la forma de un oscilador paramétrico:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \beta(t) \frac{dx}{dt} + \overline{\omega^2}(t)(x) = 0, \quad (3.16)$$

donde  $x(t)$  es la amplitud del péndulo,  $t$  el tiempo (la variable de la que depende su amplitud) y finalmente los parámetros  $\beta$  y  $\overline{\omega^2}$  que solo dependen de  $t$ . En nuestro caso suponemos que  $\rho_p$  es la amplitud y su variable independiente es la posición en el canal  $x$ . Llevando la relación (3.15) a la Ec. (3.16) se tiene:

$$\rho_p''(x) = -\beta(x) \rho_p'(x) - \overline{\omega^2}(x) \rho_p(x), \quad (3.17)$$

con

$$\beta(x) = -2\omega \operatorname{sen}(\omega x), \quad (3.18a)$$

$$\beta'(x) = -2\omega^2 \cos(\omega x), \quad (3.18b)$$

$$\overline{\omega^2}(x) = \omega^2 [5 + 4 \cos(\omega x)]. \quad (3.18c)$$

Ahora el definir las siguientes funciones nos permitirá reducir la Ec. (3.14.b):

$$D(x) := \frac{1}{2} \int^x \beta(x) dx, \quad (3.19a)$$

$$q(x) := e^{D(x)} \rho_p(x). \quad (3.19b)$$

Derivando sucesivamente a  $q(x)$  y  $D(x)$ , obtenemos:

$$q'(x) = e^{D(x)} [D'(x) \rho_p(x) + \rho_p'(x)], \quad (3.20a)$$

$$q''(x) = e^{D(x)} [D'(x)^2 \rho_p(x) + 2D'(x) \rho_p'(x) + D''(x) \rho_p(x) + \rho_p''(x)], \quad (3.20b)$$

donde

$$D'(x) = \frac{\beta(x)}{2}, \quad (3.21a)$$

$$D''(x) = \frac{\beta'(x)}{2}. \quad (3.21b)$$

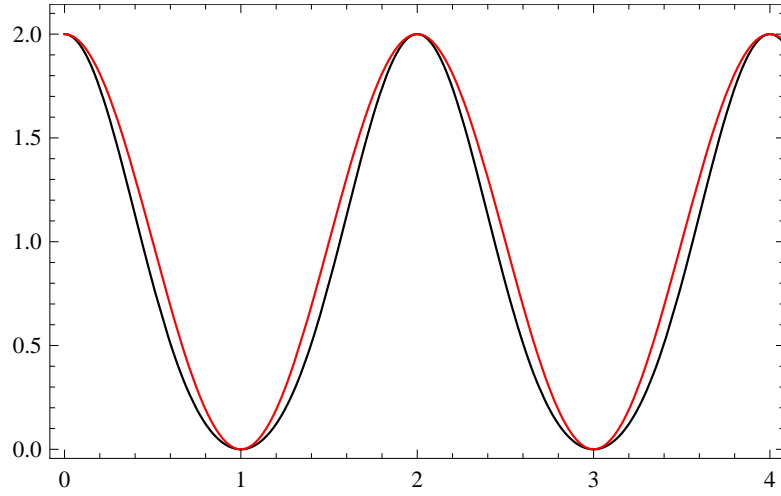


Figura 3.8: Comparación entre  $\frac{9}{10} + \cos(\omega x) + \frac{\cos(2\omega x)}{10}$  (negro) y  $1 + \cos(\omega x)$  (rojo).

Ahora sustituyendo y simplificando los valores de la Ec. (3.17), Ec. (3.19.b), Ec. (3.20.a), y Ecs. (3.21) en Ec. (3.20.b) obtenemos:

$$\begin{aligned}
 q''(x) &= e^{D(x)} \left\{ \left[ \frac{\beta(x)}{2} \right]^2 \rho_p(x) + \beta(x) \rho_p'(x) \right. \\
 &\quad \left. + \left[ \frac{\beta'(x)}{2} \right] \rho_p(x) + \left[ -\beta(x) \rho_p'(x) - \overline{\omega^2}(x) \rho_p(x) \right] \right\} \\
 &= e^{D(x)} \rho_p(x) \left[ \left[ \frac{\beta(x)}{2} \right]^2 + \frac{\beta'(x)}{2} - \overline{\omega^2}(x) \right],
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

con  $\Omega^2(x) = \overline{\omega^2}(x) - \left(\frac{\beta(x)}{2}\right)^2 - \frac{\beta'(x)}{2}$  y regresando a los valores de  $\overline{\omega^2}(x)$  y de  $\left(\frac{\beta(x)}{2}\right)^2$  que aparecen en Ecs. 3.18, tenemos:

$$q''(x) + q(x)\Omega^2(x) = 0. \tag{3.23}$$

Ahora desarrollando a  $(\Omega^2(x))$  en Ec. (3.24) y usando una aproximación que se muestra en la Fig. 3.8

$$\begin{aligned}
 \Omega^2(x) &= \omega^2[5 + 4 \cos(\omega x)] - \left[ \frac{-2\omega \operatorname{sen}(\omega x)}{2} \right]^2 - \left[ \frac{-2\omega^2 \cos(\omega x)}{2} \right] \quad (3.24) \\
 &= \omega^2[5 + 5 \cos(\omega x) - \operatorname{sen}^2(\omega x)] \\
 &= \omega^2 \left[ \frac{9}{2} + 5 \cos(\omega x) + \frac{\cos(2\omega x)}{2} \right] \\
 &= 5\omega^2 \left[ \frac{9}{10} + \cos(\omega x) + \frac{\cos(2\omega x)}{10} \right] \\
 &\approx 5\omega^2[1 + \cos(\omega x)] \\
 &= \omega_n^2[1 + f(x)],
 \end{aligned}$$

con  $\omega_n^2$  la frecuencia natural del oscilador armónico amortiguado y  $f(x)$  la función de bombeo de un oscilador armónico simple:

$$q''(x) + q(x)\omega_n^2 = -q(x)\omega_n^2 f(x). \quad (3.25)$$

Realizando un cambio de variable  $2X = \omega x$  y tomando en cuenta la última aproximación numérica de la ecuación de Ec. (3.24), resulta en las siguientes igualdades:

$$q''(X) + 20q(X)[1 + \cos(2\omega X)] = 0, \quad (3.26a)$$

$$q''(X) + q(X)[a - 2b \cos(2\omega X)] = 0, \quad (3.26b)$$

donde  $a = 20$  y  $b = -10$ . La expresión de la Ec. (3.26.b) es bien conocida como la ecuación general de Mathieu [28]. Esta es un caso especial de una ecuación diferencial de segundo orden, como las que ocurren en muchas aplicaciones de física e ingeniería<sup>123</sup>. La expresión (3.26.b) se puede deducir mediante la separación de variables de la ecuación diferencial de Helmholtz en coordenadas cilíndricas elípticas [31], y tiene solución numérica dentro de las zonas de estabilidad, más no existe una forma analítica general.

En nuestro caso, esta Ec. de Mathieu (3.26.b) se usa para describir la resonancia paramétrica en la densidad promedio de partículas en el GGL. La solución de  $q$  estará en una zona de estabilidad o inestabilidad dependiendo de los valores de  $a$  y  $b$ . En nuestro caso los valores  $a = 20$  y  $b = -10$  indican que se tiene una solución en una zona de inestabilidad marcada con un punto (rojo) en la Fig. 3.9. Un punto estrella (negro) representa un punto de estabilidad.

Para interpretar que la solución se encuentra en un punto de inestabilidad, podemos ver la Fig. 3.10. Donde se muestra un representación de  $\rho_p$  que debido a esta inestabilidad, la cantidad de partículas resulta asimétrico. También puede observarse que  $\rho_p$  se anula justamente en los puntos rojos, mismo que indican los

<sup>1</sup>Trampas iónicas cuadrupolares o de Paul,

<sup>2</sup>Efecto Stark,

<sup>3</sup>Soluciones exactas de onda plana en la relatividad general.

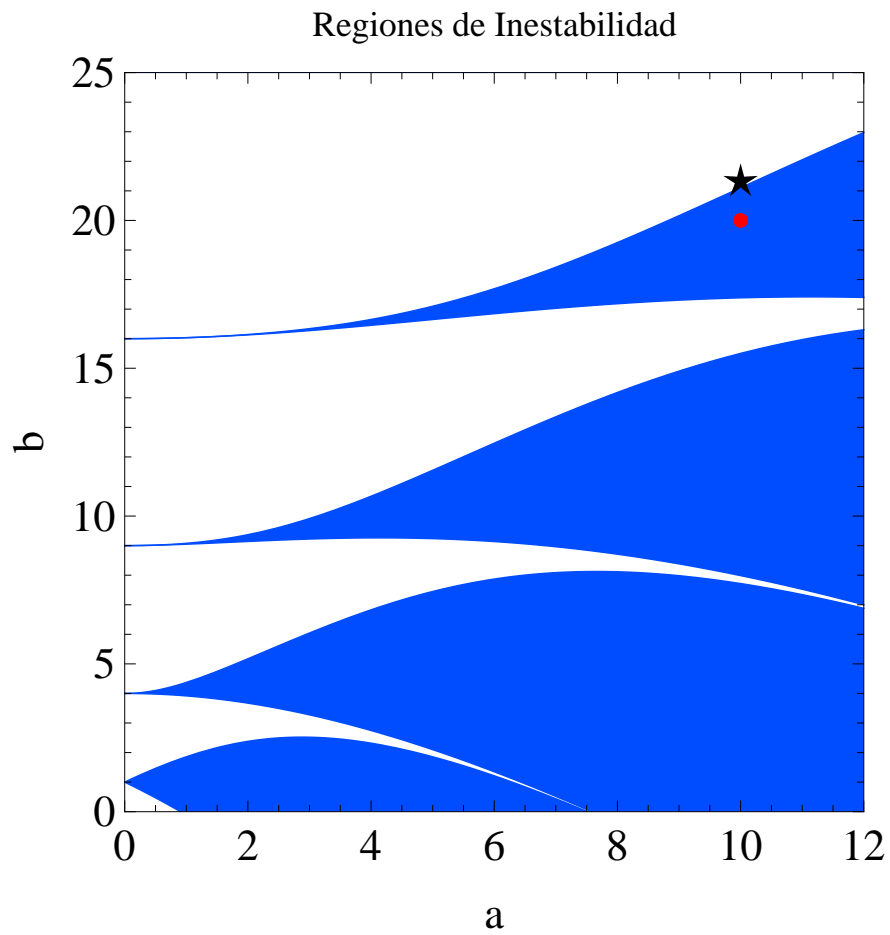


Figura 3.9: Zonas de estabilidad (regiones blancas) e inestabilidad (azul) de la solución a la ecuación de Mathieu. Con el punto rojo mostrando la solución de nuestro problema y la estrella negra denotando una solución en la zona de estabilidad cercano a nuestro caso.

centros de las trampas en la red. Sin embargo, esto no es así en el caso de un punto estable.

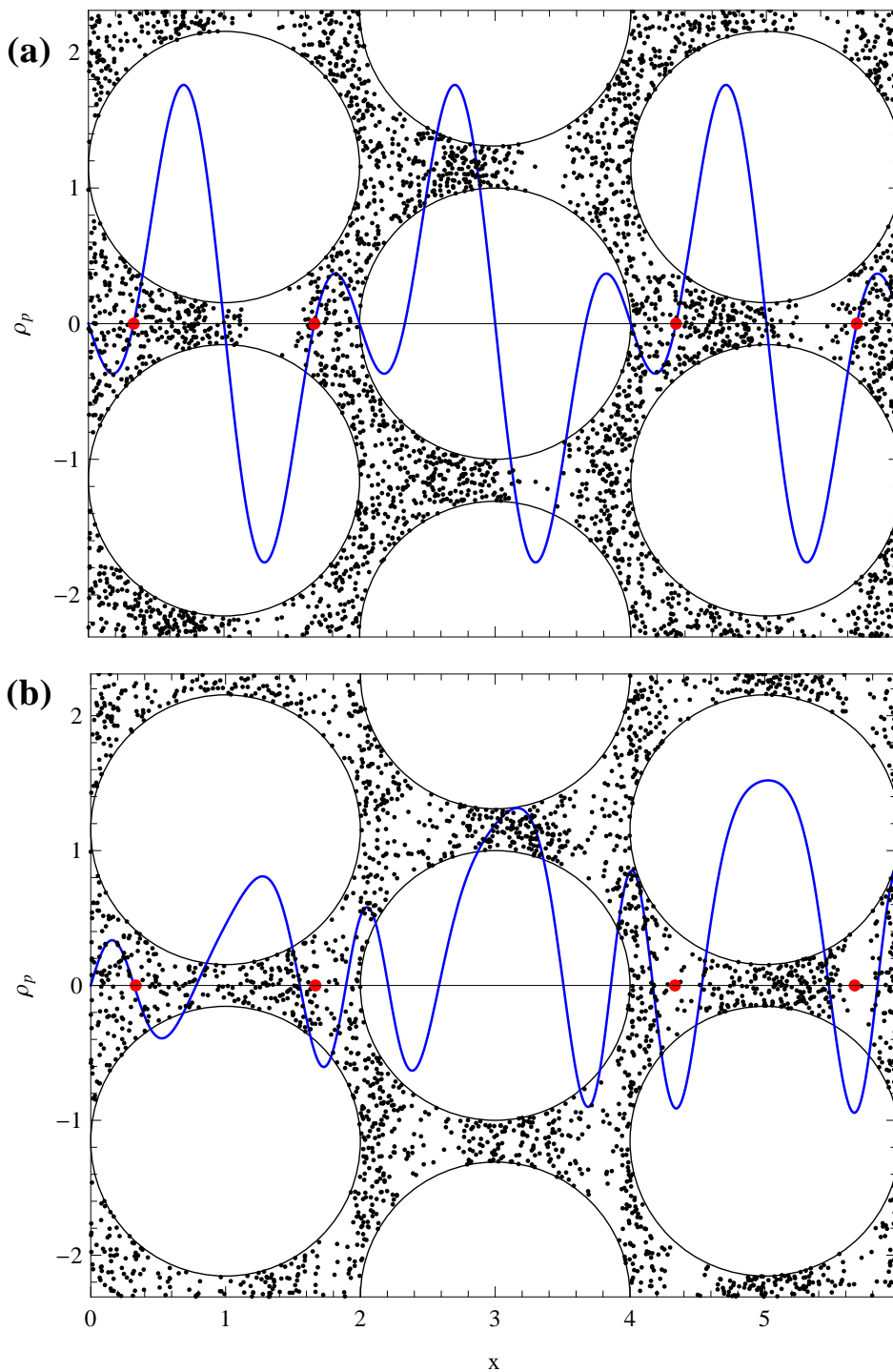


Figura 3.10: Gráfica de  $\rho_p$  en la red triangular con una representación de la cantidad de número de partículas a lo largo del canal (a). Si  $\rho_p$  fuera la función en la zona de estabilidad denotada en la Fig. 3.9 (b). Con los puntos rojos mostrando los centros de las trampas.

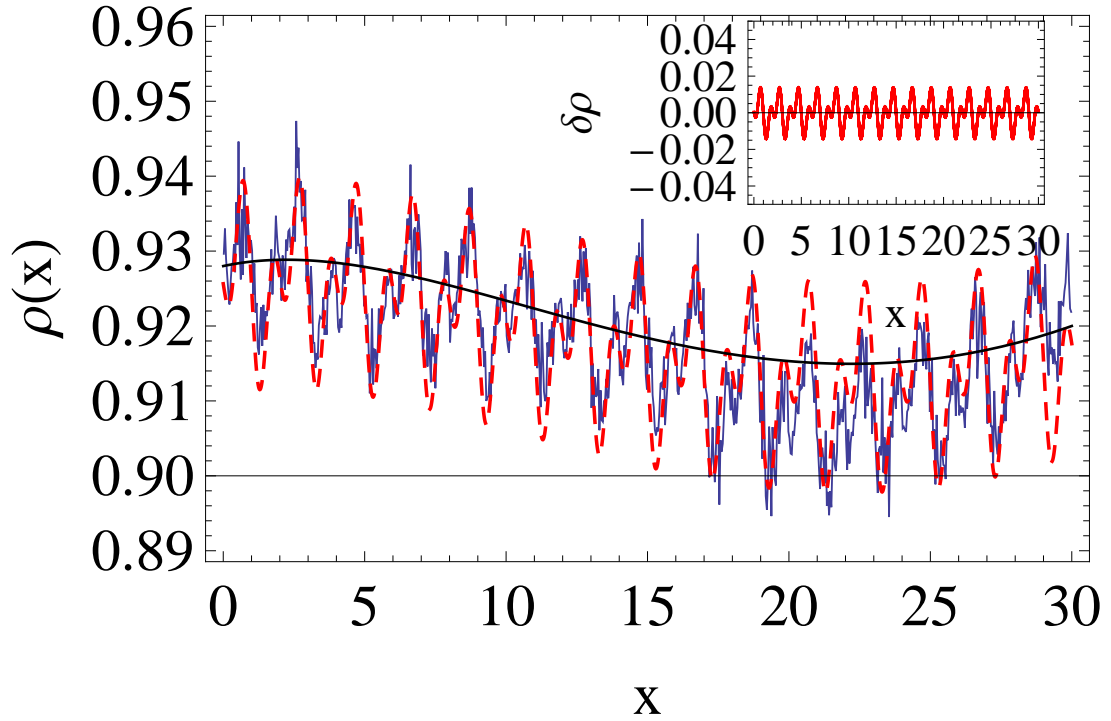


Figura 3.11: Perfil de la densidad en el canal cuando  $E = 2$ . La línea sólida azul muestran los datos de simulación mientras que las líneas a trazos roja forma  $\rho$ . La Fig. insertada representa la cantidad fluctuante  $\rho_p$  y la función negra es la envolvente  $\rho_e$ .

Como se expone en la Fig. 3.11, ahora se puede comparar  $\rho$  de todos los perfiles obtenidos con la solución envolvente  $\rho_e$  y la del péndulo paramétrico  $\rho_p$ .

Este análisis se realizó para diferentes valores del campo  $E$  aplicado y bajo diferentes longitudes del canal. Todos los casos que enseguida se presentan corresponden al valor  $\omega = \omega_c$ . Los detalles de los experimentos se presentan en los pies de figuras correspondientes. En la Fig. 3.12 se puede observar que las oscilaciones en la densidad, obtenida desde la dinámica molecular, son bien descritas por la Ec. (3.14.a). A medida que la longitud el canal aumenta Fig. 3.13, la solución de  $\rho$  descrita por esta Ec. (3.14.a), aún puede ajustar la oscilación de onda larga de la densidad promedio en el canal. Sin embargo, cuando se incrementa aún más la longitud del canal como en las Figs. 3.14, 3.15 y 3.16, nuestro modelo solo puede ajustar las oscilaciones pequeñas alrededor de los discos.

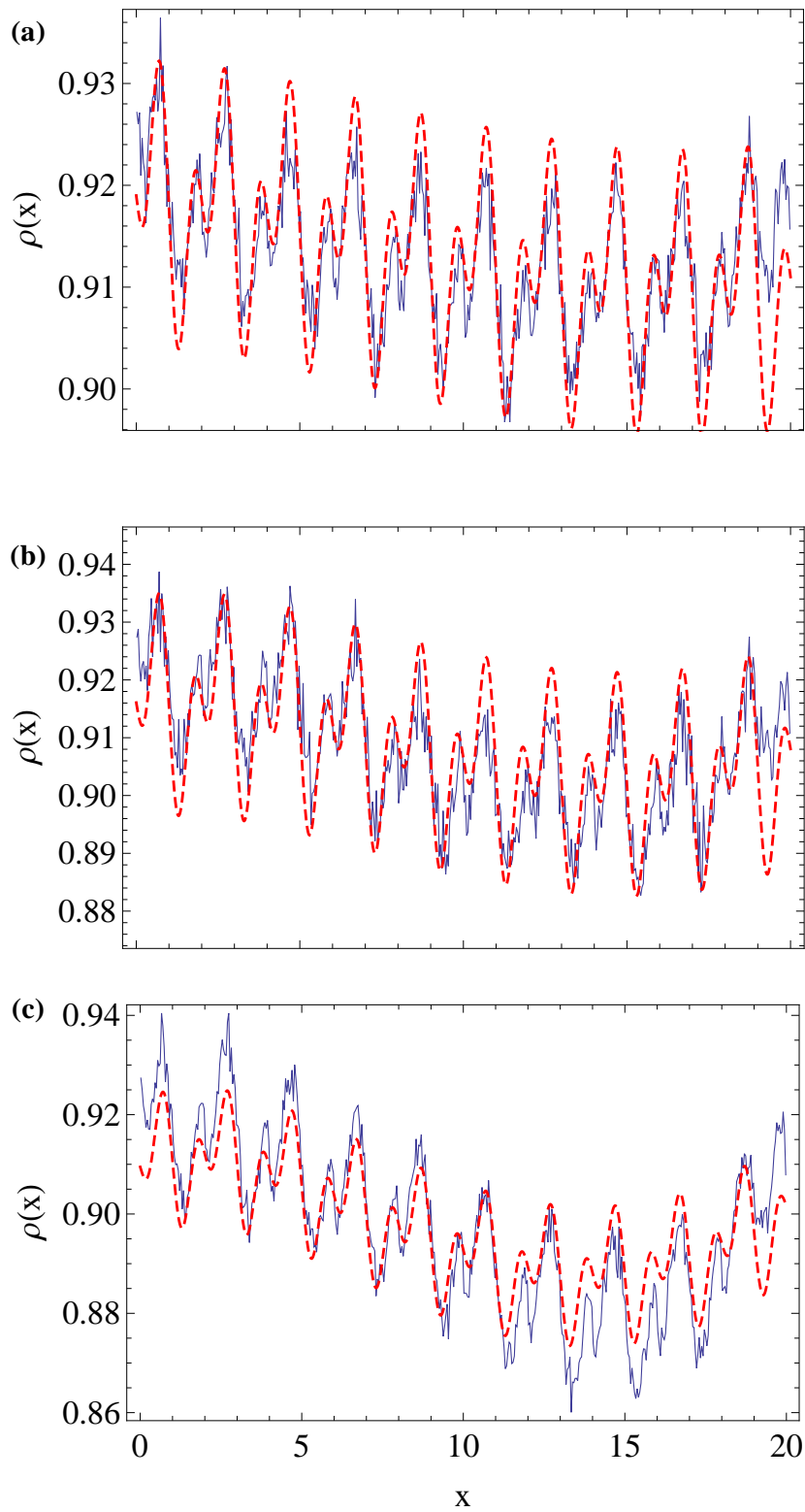


Figura 3.12: Perfiles de la densidad del GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c). Para  $L = 20$

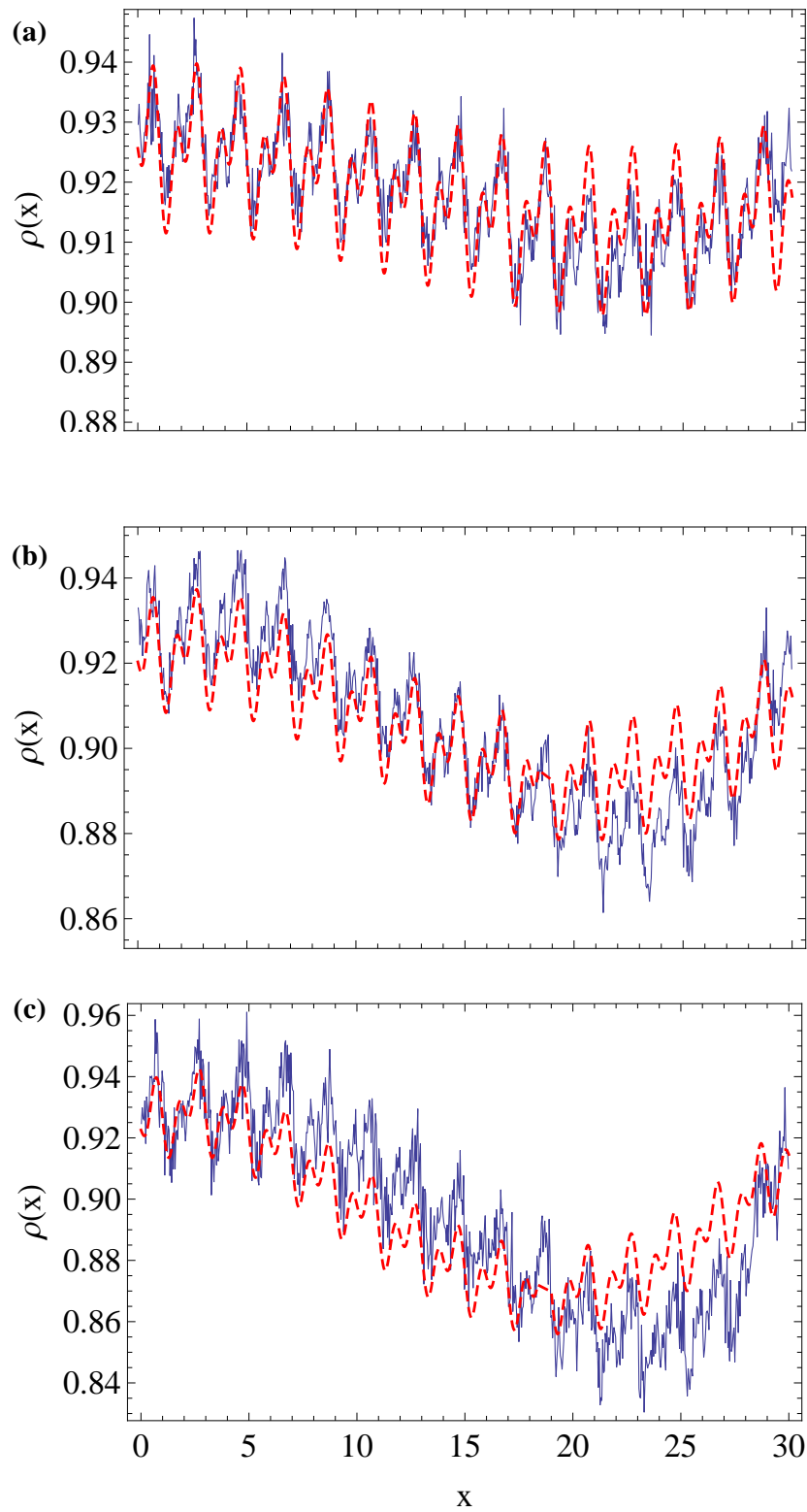


Figura 3.13: Perfiles de la densidad del GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c). Para  $L = 30$

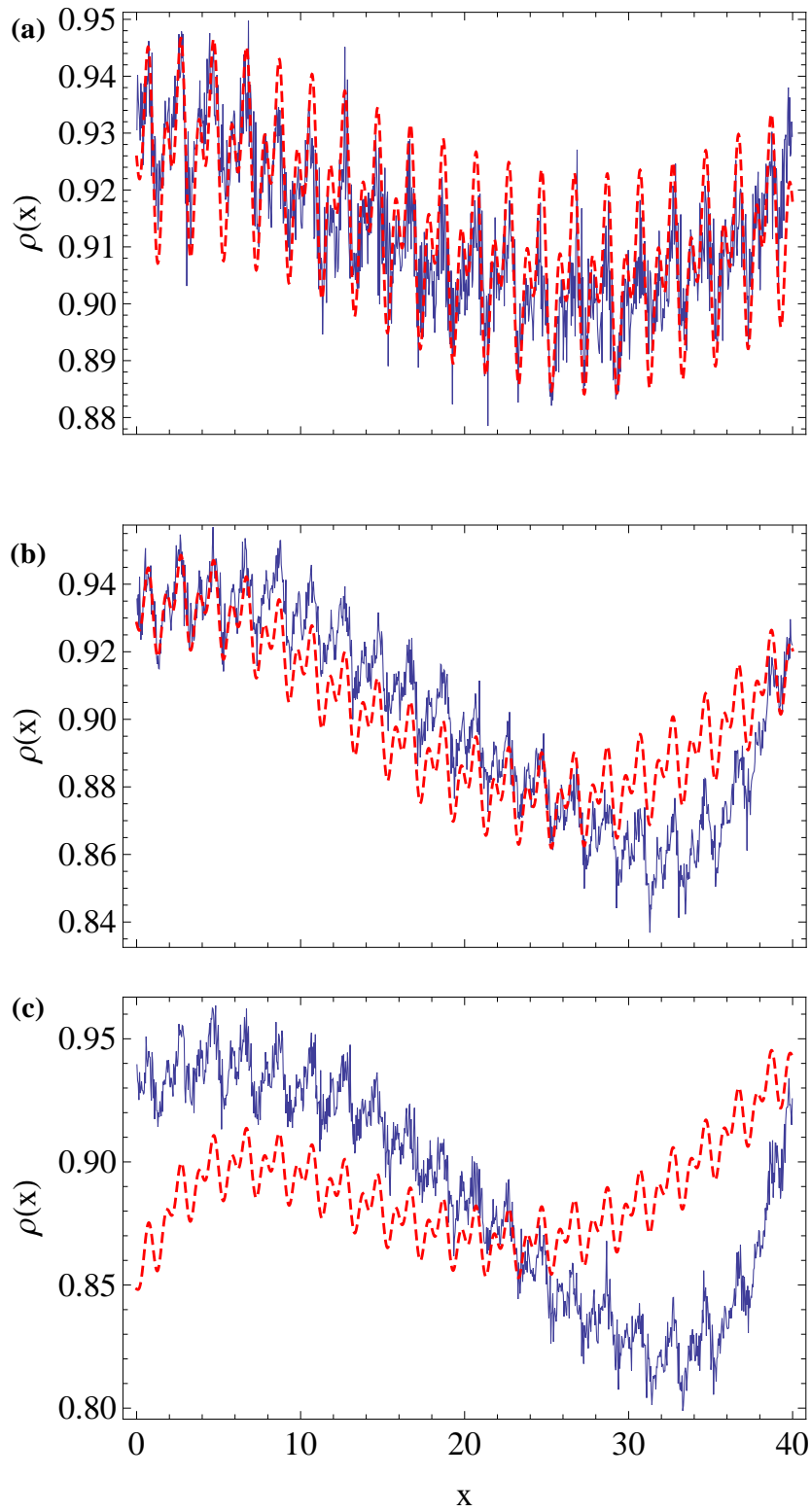


Figura 3.14: Perfiles de la densidad del GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c). Para  $L = 40$

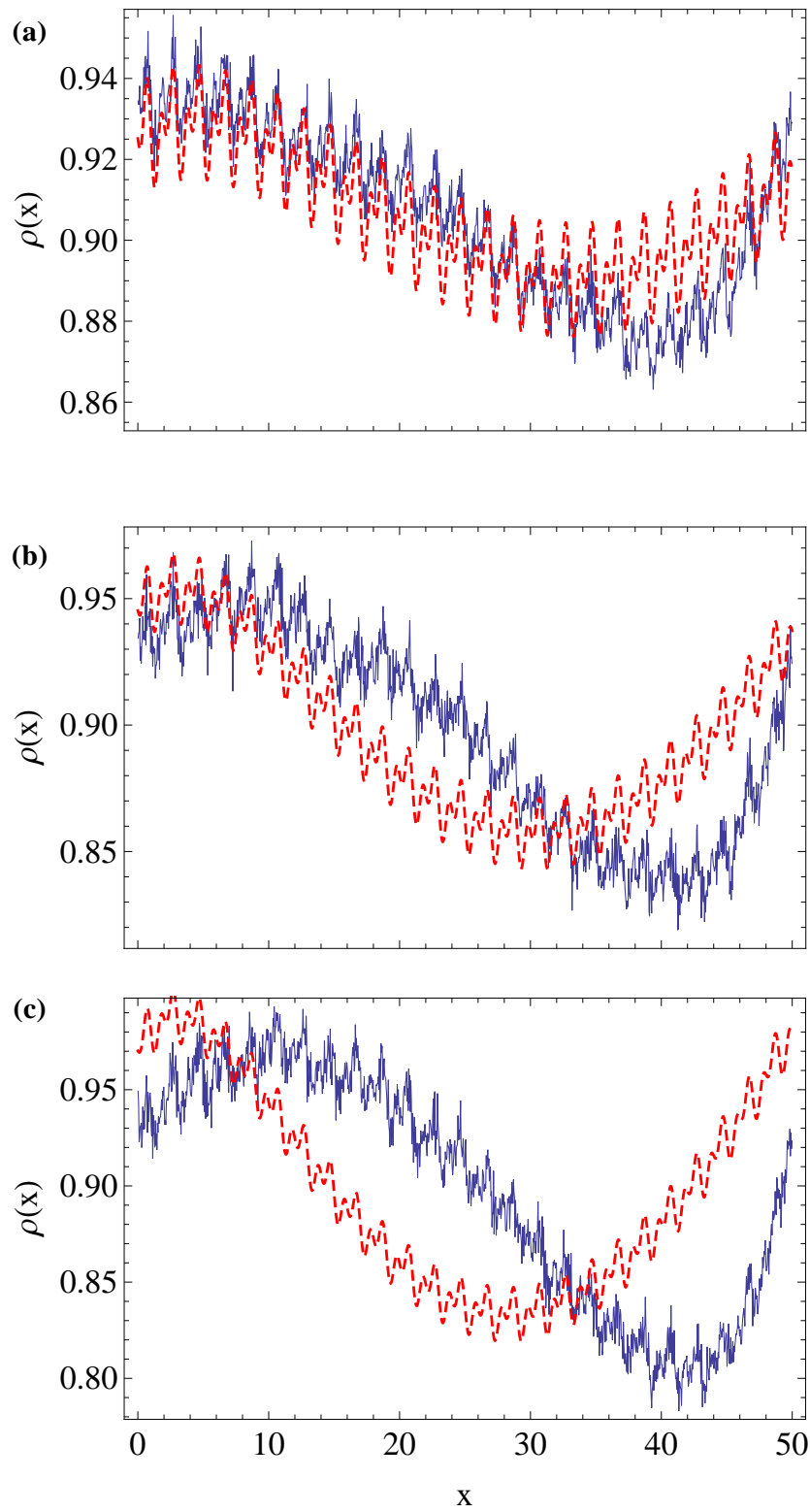


Figura 3.15: Perfiles de la densidad del GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c). Para  $L = 50$

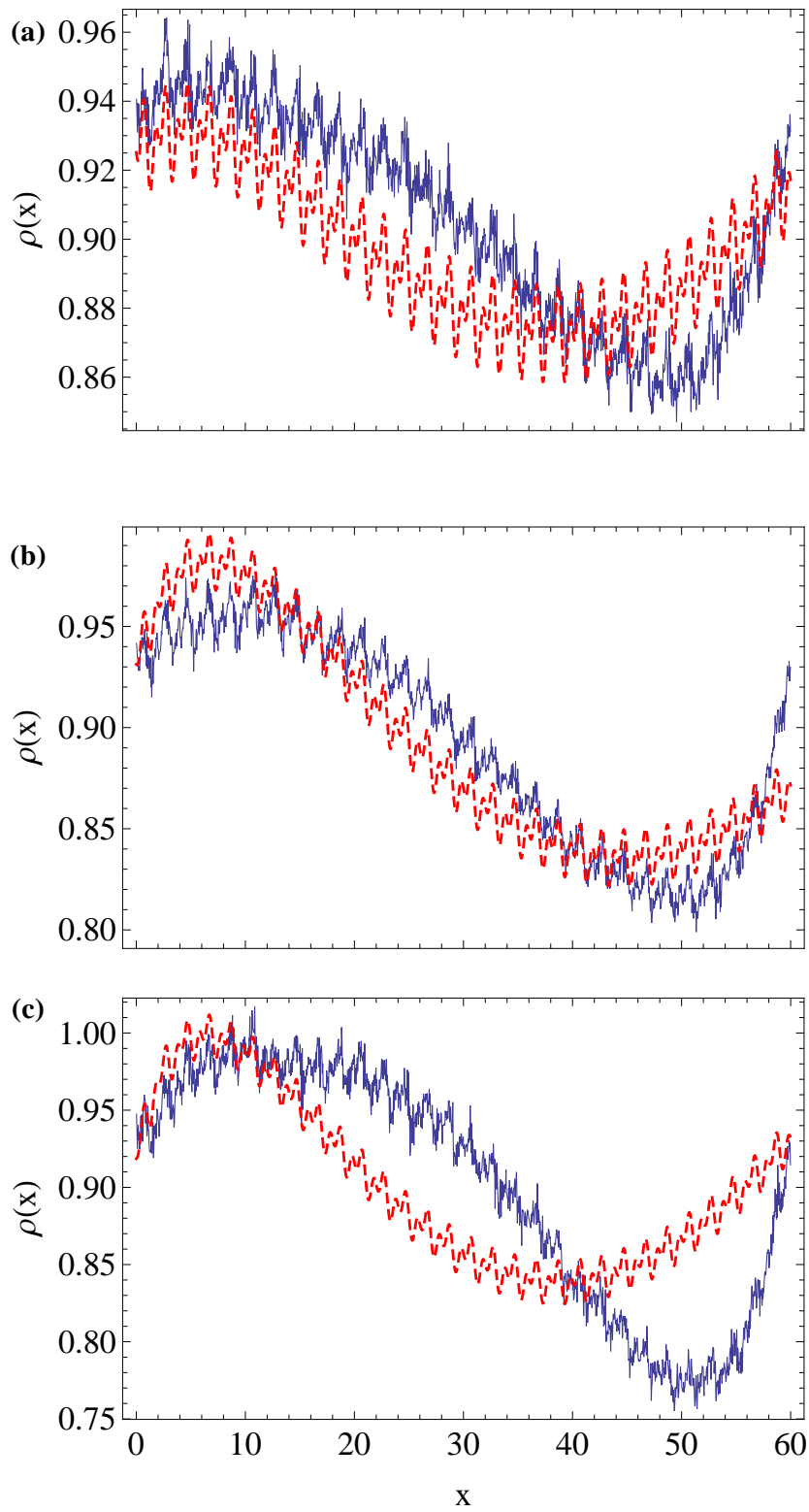


Figura 3.16: Perfiles de la densidad del GGL cuando  $E = 2$  (a),  $E = 3$  (b) y  $E = 4$  (c). Para  $L = 60$

# Conclusiones

El trabajo presentado a lo largo de esta tesis tiene su interés en la posibilidad de estudiar la relación entre las propiedades de transporte del gas de Lorentz, con las propiedades dinámicas microscópicas de este sistema. Determinar las condiciones de estabilidad para la distribución de cargas dentro de este sistema, puede ayudar a mejorar el diseño de optimización del transporte de carga en materiales micrométricos. Por otra parte, el conocimiento generado en la solución de este tema, podría ayudar a entender otros fenómenos de transporte, por ejemplo, el transporte de calor en capas microscópicas de materiales porosos desordenados, en donde se busca la optimización en la disipación de calor.

El análisis del patrón de la densidad electrónica del gas de Lorentz, bajo la influencia de un campo eléctrico externo, arroja las siguientes conclusiones.

- A partir del programa de la simulación numérica del gas de Lorentz, gas de partículas que se mueven en un canal con discos dispersores bajo la influencia de un campo eléctrico, se obtuvieron los perfiles tanto de la densidad electrónica como de la temperatura del sistema.
- Usando diferentes valores del campo eléctrico  $E$ , del espacio entre los discos  $\omega$ , así como diferentes valores de la longitud del canal  $L$ , fue posible observar las discrepancias entre los diferentes perfiles de la densidad electrónica
- El modelo propuesto para una descripción hidrodinámica de las corrientes de flujo de energía y masa, toma en cuenta las pérdidas por el calor de Joule.
- Las oscilaciones en la densidad de las partículas alrededor de cada disco dispersor, atribuidas al acoplamiento entre el transporte del calor y la materia, son soluciones típicas del péndulo paramétrico.
- Valores característicos de  $E$ ,  $n$  y  $L$ , pueden generar zonas de estabilidad de la densidad electrónica a lo largo del canal.



# Apéndice A

## Programa Fortran

```

1 *****
2 SubRoutine X_Structure
3   Use MathConstants
4   Use Constants
5   Use Discs
6   Use Lattice
7   Use Results
8   Implicit None
9
10  Integer :: CurrDisc, j
11  Real(8) :: Xc(1:2), A(1:2)
12  Real(8) :: Xa, Xb, Ya, Yb
13  Real(8) :: m, b, Xlim, Alim, eps
14
15  eps = 0.000000000000001_8
16  CurrDisc = 1
17  Xc(1) = Disc(1, CurrDisc, 1)
18  Xc(2) = Disc(1, CurrDisc+1, 1)
19  Do j = 1, Xbin
20    Xa = Xmin + (j-1)*Xesc
21    Xb = Xa + Xesc
22    If (Xb .gt. Xc(2)) Then
23      If (CurrDisc .eq. Ncell -1) Then
24        Xc(1) = Xc(2)
25        Xc(2) = Xc(2) + 10.0_8
26      Else
27        CurrDisc = CurrDisc + 1
28        Xc(1) = Disc(1, CurrDisc, 1)
29        Xc(2) = Disc(1, CurrDisc+1, 1)
30      End If
31    End If
32    ! Area under disc 1
33    If (Xc(1)+r-Xa .gt. eps) Then
34      If (Xc(1)+r-Xb .gt. eps) Then
35        A(1) = Area(Xa, Xb, Xc(1))
36      Else
37        A(1) = Area(Xa, Xc(1)+r, Xc(1))
38      End If
39    Else
40      A(1) = 0.0_8
41    End If
42    ! Area under disc 2
43    If (Xb-Xc(2)+r .gt. eps) Then
44      If (Xa-Xc(2)+r .gt. eps) Then
45        A(2) = Area(Xa, Xb, Xc(2))
46      Else
47        A(2) = Area(Xc(2)-r, Xb, Xc(2))
48      End If
49    Else
50      A(2) = 0.0_8
51    End If
52    SpaceX(j) = Q*Xesc - A(1) - A(2)
53  End Do
54
55  Xlim = Disc(1, 1, 1) - S/2.0_8
56  m = 2.0_8*Q/S
57  b = 2.0_8*Q
58  Do j = 1, Xbin
59    Xa = Xmin + (j-1)*Xesc

```

## Apéndice A. Programa Fortran

```
61   Xb = Xa + Xesc
    Ya = m*Xa + b
    Yb = m*Xb + b
63   If (Xb .lt. Xlim) Then
        Alim = ((Q-Yb) + (Yb-Ya)/2.0_8)*Xesc
65   Else
        If (Xa .lt. Xlim) Then
67           Alim = (Xlim-Xa)*(Q-Ya)/2.0_8
            Else
69             Exit
            End If
71   End If
    SpaceX(j) = SpaceX(j) - Alim
73 End Do

75 Xlim = Disc(1,Ncell,1) + S/2.0_8
    m   = -2.0_8*Q/S
77   b   = -m*(Xlim + S/2.0_8)
    Do j = Xbin,1,-1
79     Xa = Xmin + (j-1)*Xesc
        Xb = Xa + Xesc
81     Ya = m*Xa + b
        Yb = m*Xb + b
83     If (Xa .gt. Xlim) Then
            Alim = ((Q-Ya) + (Ya-Yb)/2.0_8)*Xesc
85     Else
            If (Xb .gt. Xlim) Then
87                 Alim = (Xb-Xlim)*(Q-Yb)/2.0_8
                    Else
89                     Exit
                    End If
            End If
91     SpaceX(j) = SpaceX(j) - Alim
93 End Do
    SpaceX = 4.0_8*SpaceX
95
    Contains
97
    Function Area (Xa,Xb,Xc)
99     Implicit None
101
    Real(8),Intent(In) :: Xa,Xb,Xc
    Real(8)           :: Area
103   Real(8)           :: Amin,Amx
    Real(8)           :: X1,X2
105
    X1 = Xa - Xc
    X2 = Xb - Xc
107   Amin = X1*dsqrt(r**2 - X1**2)/2.0_8 + (r**2/2.0_8)*dasin(X1/r)
    Amx  = X2*dsqrt(r**2 - X2**2)/2.0_8 + (r**2/2.0_8)*dasin(X2/r)
109   Area = Amx - Amin
111
    End Function Area
113 End SubRoutine X_Structure
```

structure.f95

## Apéndice A. Programa Fortran

```

2 SubRoutine GetCollisionTime(Pp)
3   Use Constants, ONLY: Collision
4   Use Discs
5   Use Field
6   Use Masses
7   Use Particles
8   Use Times, ONLY: Tcol, Twall
9   Use Walls, ONLY: Nwo
10  Implicit None
11
12  INTERFACE
13    SUBROUTINE qtcrt (a, z, Qr)
14      USE constants_NSWC
15      IMPLICIT NONE
16      REAL (dp), INTENT(IN)      :: a(:)
17      Integer, Intent(Out)      :: Qr
18      COMPLEX (dp), INTENT(OUT) :: z(:)
19    END SUBROUTINE qtcrt
20  END INTERFACE
21  INTERFACE
22    SUBROUTINE SORT (zv)
23      IMPLICIT NONE
24      REAL(8), intent(inout) :: zv(:)
25    END SUBROUTINE Sort
26  End INTERFACE
27
28  Integer, Intent(In) :: Pp
29  Real(8)              :: dx, dy, accel, V, root
30  Real(8)              :: a(0:4)
31  Complex(8)          :: z(1:4)
32  Real(8)              :: zv(1:4)
33  Integer              :: Qr, i
34
35  If (E == 0.0_8) Then
36    If (Nwo(Pp) /= 0) Then
37      dx = Xo(Pp) - Xd(Pp)
38      dy = Yo(Pp) - Yd(Pp)
39      V = Vx(Pp)**2 + Vy(Pp)**2
40      root = (dx*Vx(Pp) + dy*Vy(Pp))**2 - V*(dx**2 + dy**2 - r**2)
41      If (root >= 0.0_8) Then
42        Tcol = (1.0/V)*(-dx*Vx(Pp) - dy*Vy(Pp) - dsqrt(root))
43        Collision = .true.
44      Else
45        Collision = .false.
46      End If
47    Else
48      Collision = .false.
49    End If
50  Else
51    dx = Xo(Pp) - Xd(Pp)
52    dy = Yo(Pp) - Yd(Pp)
53    accel = (ec*E)/(2.0_8*mp)
54    V = Vx(Pp)**2 + Vy(Pp)**2
55    a(4) = accel**2
56    a(3) = 2.0_8*accel*Vx(Pp)
57    a(2) = V + 2.0_8*accel*dx
58    a(1) = 2.0_8*(dx*Vx(Pp) + dy*Vy(Pp))
59    a(0) = (dx**2 + dy**2 - r**2)
60    CALL qtcrt(a, z, Qr)
61    Collision = .false.
62    If (Nwo(Pp) == 0) Then
63      If (Qr > 2) Then
64        zv = dble(z)
65      End If
66    Call Sort(zv)
67      Call dsortq('A',4,zv,1)
68      Tcol = dble(zv(3))
69      If ((Tcol > 0.0_8) .and. (Tcol < Twall)) Then
70        Collision = .true.
71      End If
72    Else
73      If (Qr > 0) Then
74        Tcol = MinVal(dble(z(1:Qr)), mask=dble(z(1:Qr)) > 0.0_8)
75        If (Tcol < Twall) Then
76          Collision = .true.
77        End If
78      End If
79    End If
80  End If
81
82 End SubRoutine GetCollisionTime

```



# Bibliografía

- [1] H. A. Lorentz, Arch. Neerl. 10, 336, (1905) [reprinted in Col lected Papers (Nijhoff, The Hague, 1936), Vol. III, p. 180.
- [2] P. Drude, Ann. Phys. Leipzig 1, 566, (1900); 3, 369 (1900).
- [3] B. Moran, W. G. Hoover, and S. Bestiale, J. Stat. Phys. 48, 709 (1987).
- [4] A. Lue and H. Brenner, Phys. Rev. E 47, 3128 (1993).
- [5] N. I. Chernov, G. L. Eyink, J. L. Lebowitz, and Ya. G. Sinai, Phys. Rev. Lett. 70, 2209 (1993).
- [6] N. I. Chernov, G. L. Eyink, J. L. Lebowitz, and Ya. G. Sinai, Phys. Rev. Lett. **70**, 2209 (1993).
- [7] J. Piasecki and E. Wajnryb, J. Stat. Phys. 21, 549 (1979).
- [8] D. Alonso, R. Artuso, G. Casati, and I. Guarneri, Phys. Rev. Lett. 82:1859 (1999).
- [9] A. Dhar and D. Dhar, Phys. Rev. Lett. 82:480 (1999).
- [10] C. M. Monasterio, H. Larralde, F. Leyvraz, Phys. Rev. Lett. **86**, 5417, (2001)
- [11] H. Larralde, C. Mejía-Monasterio, F. Leyvraz, *Transport properties of a modified Lorentz gas*, J. Stat. Phys. **113**, Nos 1/2, 197 (2003).
- [12] G. Casati, C, M Monasterio, T. Prosen, Phys. Rev. Lett. **101**, 016601 (2008)
- [13] G. Casati, C, M Monasterio, IP Conf. Proc 1076, 18 (2008)
- [14] Lorentz H. A. The motion of electrons in metallic bodies. Proc. Amst. Acad. 7: 438, (1904).
- [15] L. A. Bunimovich and Ya. G. Sinai, Commun. Math. Phys. 78, 247 (1980); 78, 479 (1981).

- [16] J. Machta and R. Zwanzig, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1959 (1983).
- [17] B. Friedman and R. F. Martin, *Phys. Lett.* **105 A**, 23 (1984); *Physica D* **30**, 219 (1988).
- [18] J. Machta and B. Reinhold, *J. Stat. Phys.* **42**, 949 (1986).
- [19] L. A. Bunimovich, Ya. G. Sinai, and N. I. Chernov, *Russ. Math. Surv.* **46**, 47 (1991).
- [20] Bleher P. M. *J. Stat. Phys.* **66**, 315 (1992).
- [21] *Hard Ball systems and the Lorentz Gas*, Ed. by D. Szas, Springer (2000).
- [22] Chernov N. I. y Dolgopyat. D. American Mathematical Society, **927**, (2009).
- [23] Sinai Ya. G. (editor) *Dynamical Systems, Ergodic Theory and Applications*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, (2000).
- [24] Lebowitz J. L. y Bergmann P. G. *Ann. Phys.* **1**, 1-23, (1957).
- [25] S. Leitmann, T. Franosch, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 190603 (2013)
- [26] A. Najdecka, T. Kapitaniak, M. Wiercigroch, *International Journal of Non-Linear Mechanics* **70** 84-94, (2015).
- [27] Xu Xu and M. Wiercigroch, *Nonlinear Dyn.* **47**, 311-320, (2007)
- [28] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, U.S. Govt. Printing Office, 1964 (reprinted by Dover, New York, 1965), Chap. 20. A more extensive treatment with the same notation is by N. W. McLachlan, *Theory of Application of Mathieu Functions* (Oxford U. P., Oxford, 1947) (reprinted by Dover, New York, 1964).
- [29] Callen, *Phys. Rev.* **73**, 1349 (1948).
- [30] C. K. Hu, *Electromigration in Thin Films and Electronic Devices: Introduction. Modeling electromigration phenomena*. Woohhead Publishing, 2011.
- [31] Zwillinger, D. *Handbook of Differential Equations*, 3rd ed. Boston, MA: Academic Press, p. 125, 1997.