MÁQUINAS TÉRMICAS QUÂNTICAS OPERANDO COM SISTEMAS DE DOIS NÍVEIS

Thiago Velloso Cruz[1], Roberto Baginski Batista Santos[2]
[1,2] Centro Universitário FEI
thiago.575@hotmail.com; rsantos@fei.edu.br

Resumo: O projeto consiste em relacionar as teorias da termodinâmica clássica com a física quântica através de um modelo para uma máquina térmica quântica composta por um dipolo magnético de spin-1/2 submetido a um campo magnético externo, o que é um sistema quântico de dois níveis, associado a fontes de calor externas. Determinamos as propriedades quânticas do sistema, grandezas termodinâmicas de estado como energia interna e entropia e grandezas de processo como calor e trabalho para os processos isomagnético, isentrópico e isotérmico.

1. Introdução

As relações entre a física quântica e a termodinâmica são um tópico de interesse por conta do desenvolvimento da computação quântica, que destacou o papel da entropia, uma grandeza tipicamente termodinâmica, na compreensão das noções informacionais presentes na teoria quântica. Mais recentemente, avanços tecnológicos permitiram a construção das primeiras máquinas térmicas quânticas em 2016[1,2]. Uma máquina térmica quântica é um sistema termodinâmico que pode ser operado de modo cíclico para realizar trabalho e que depende das propriedades quânticas da substância de trabalho. Neste trabalho, descrevemos processos termodinâmicos básicos como os processos isomagnético, isentrópico e isotérmico em sistemas de dois níveis (sistemas de spin-1/2 submetidos a um campo magnético externo) visando à identificação de trabalho e de calor em cada processo. Estes processos termodinâmicos quânticos serão usados, em uma próxima etapa do trabalho, para determinar a eficiência de uma máquina térmica quântica que opera entre uma fonte quente e uma fonte fria.

2. Metodologia

O operador hamiltoniano que representa a energia de interação entre o dipolo magnético $\vec{\mu} = \gamma\vec{S}$ associado a uma partícula de spin-1/2 com operador de spin dado por $\vec{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$ e um campo magnético externo $\vec{B} = B\hat{k}$, é[3]

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \frac{\hbar|\gamma|}{2}\sigma_z \tag{1}$$

em que $\gamma < 0$ é a razão giromagnética do sistema, escolhido como sendo um sistema que exibe paramagnetismo eletrônico como $TiCl_3$, VCl_4 ou outros sais paramagnéticos, $\hbar$ é a constante de Planck racionalizada e σ_z é um operador de spin de Pauli. As energias possíveis para o sistema são os autovalores de H e são dadas por

$$E_\pm = \pm\frac{\hbar|\gamma|B}{2}, \tag{2}$$

o que mostra que se trata de um sistema com dois níveis de energia. Todas as propriedades termodinâmicas de um sistema podem ser determinadas a partir da função de partição[4]

$$Z = \sum_n e^{-E_n/kT} = 2\cosh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{kT}\right) \tag{3}$$

e da distribuição de Boltzmann para as probabilidades de ocupação dos estados quânticos do sistema[4]

$$p_n = \frac{e^{-E_n/kT}}{Z} \tag{4}$$

em que k é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do sistema. O valor médio $\langle X\rangle$ de uma grandeza termodinâmica X é calculado por

$$\langle X\rangle = \sum_n p_n X_n \tag{5}$$

Além disso, como a energia interna U do sistema é, por definição, o valor médio $\langle H\rangle$ da energia do sistema

$$U = \langle H\rangle = \sum_n p_n E_n, \tag{6}$$

uma variação infinitesimal dU da energia interna é dada por[5]

$$dU = \sum_n (E_n dp_n + p_n dE_n) = dQ - dW \tag{7}$$

o que permite identificar o calor infinitesimal dQ recebido pelo sistema e o trabalho infinitesimal dW realizado pelo sistema como

$$\begin{cases} dQ = \sum_n E_n dp_n \\ dW = -\sum_n p_n dE_n \end{cases} \tag{8}$$

3. Resultados

A partir das equações apresentadas anteriormente, podemos desenvolver grandezas de estado da termodinâmica quântica, tais como o valor médio da componente do momento de dipolo magnético ao longo da direção do campo magnético externo

$$\langle\mu_z\rangle = \frac{\hbar|\gamma|}{2}\tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{2kT}\right) \tag{9}$$

o valor médio da energia ou a energia interna

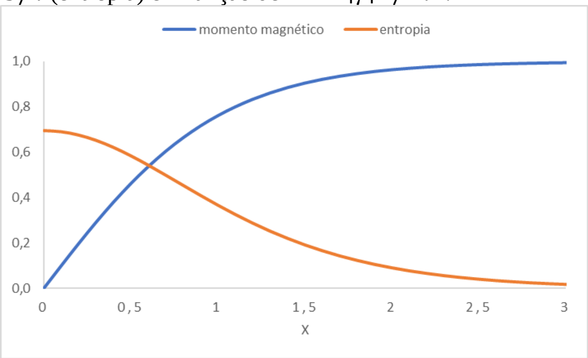
$$U = -\frac{\hbar|\gamma|B}{2}\tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{2kT}\right) \tag{10}$$

e a entropia S do sistema de dois níveis

$$S = k\left(\ln\left(2\cosh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{2kT}\right)\right) - \frac{\hbar|\gamma|B}{2kT}\tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{2kT}\right)\right). \tag{11}$$

A figura (1) apresenta o momento de dipolo magnético e a entropia de um sistema de dois níveis em função de $\hbar|\gamma|B/2kT$. Pode-se observar que, no limite em que $B/T \to 0$ (campo magnético fraco ou altas temperaturas), o momento de dipolo magnético se anula e a entropia é máxima, o que corresponde a uma situação de máxima desordem, em que as probabilidades de ocupação dos dois estados do sistema são iguais. No limite em que $B/T \to \infty$, o momento magnético é máximo e a entropia é mínima, correspondendo ao caso em que a probabilidade de ocupação do estado de menor energia do sistema se aproxima de 100% e há muito pouca desordem no sistema. Para valores intermediários de B/T, o momento magnético aumenta e a entropia diminui.

Figura 1. Gráficos de $2\langle\mu_z\rangle/\hbar|\gamma|$ (momento magnético) e de S/k (entropia) em função de $X = \hbar|\gamma|B/2kT$.



Fonte: Autores.

Além disso, usando as expressões da equação (8) e levando em conta que o campo magnético externo B e a temperatura T são as únicas variáveis no sistema, é possível determinar grandezas de processo como o calor e o trabalho infinitesimais:

$$\begin{cases} dQ = -\dfrac{\hbar^2|\gamma|^2 B}{4kT\cosh^2\left(\dfrac{\hbar|\gamma|B}{2kT}\right)}\left[dB - \dfrac{B}{T}dT\right] \\ dW = \dfrac{\hbar|\gamma|}{2}\tanh\left(\dfrac{\hbar|\gamma|B}{2kT}\right)dB \end{cases} \quad (12)$$

pois

$$\begin{cases} dp_n = \dfrac{\partial p_n}{\partial B}dB + \dfrac{\partial p_n}{\partial T}dT \\ dE_n = \dfrac{\partial E_n}{\partial B}dB + \dfrac{\partial E_n}{\partial T}dT \end{cases} \quad (13)$$

As expressões da equação (12) podem ser usadas para obter o calor recebido pelo sistema e o trabalho realizado pelo sistema em alguns processos termodinâmicos importantes. No caso de um processo isomagnético, em que o campo magnético B é mantido constante, $W = 0$ e

$$Q = -\frac{\hbar|\gamma|B}{2}\left(\tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{2kT_f}\right) - \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{2kT_i}\right)\right). \quad (14)$$

Em um processo isomagnético, a variação da energia interna é causada pela variação das probabilidades de ocupação dos estados quânticos do sistema, o que corresponde a uma variação da temperatura do sistema. A equação (14) confirma isso, mostrando que $T_f > T_i$ se o sistema receber calor ($Q > 0$) sem que haja variação de campo magnético.

No caso de um processo isentrópico, em que não variação da entropia S do sistema, o que neste caso significa que a razão B/T e o momento de dipolo magnético são mantidos constantes, $Q = 0$ e

$$W = \frac{\hbar|\gamma|}{2}\tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_f}{2kT_f}\right)(B_f - B_i). \quad (15)$$

Neste processo isentrópico, a variação da energia interna do sistema é causada pela variação das energias dos estados quânticos, que dependem diretamente do campo magnético B aplicado ao sistema. Porém, como a razão B/T é constante, as probabilidades de ocupação dos estados não são afetadas pela alteração nas energias dos estados, não havendo, portanto, absorção de calor, o que significa que o processo também é adiabático.

Finalmente, no caso de um processo isotérmico, em que a temperatura T é mantida constante

$$\begin{cases} W = kT\ln\left(\dfrac{\cosh\left(\dfrac{\hbar|\gamma|B_f}{2kT}\right)}{\cosh\left(\dfrac{\hbar|\gamma|B_i}{2kT}\right)}\right) \\ Q = W - \dfrac{\hbar|\gamma|B}{2}\left(\tanh\left(\dfrac{\hbar|\gamma|B_f}{2kT}\right) - \tanh\left(\dfrac{\hbar|\gamma|B_i}{2kT}\right)\right) \end{cases} \quad (16)$$

É importante observar que o processo isotérmico, ao contrário do que acontece com gases ideais não é isoenergético, isto é, há variação da energia interna do sistema durante um processo isotérmico com sistemas de dois níveis. Neste processo isotérmico, tanto as energias dos estados quânticos quanto as probabilidades de ocupação são alteradas por causa da variação do campo magnético externo sem alteração correspondente na temperatura. Como a variação da energia interna é

$$\Delta U = -\frac{\hbar|\gamma|B}{2}\left(\tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_f}{2kT}\right) - \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_i}{2kT}\right)\right) \quad (17)$$

é possível observar que a energia interna diminui se o campo magnético aumenta, o que corresponde tanto a um aumento da magnitude do dipolo magnético quanto a um maior alinhamento entre o dipolo magnético e o campo externo.

4. Conclusões

Apresentamos um modelo de uma máquina térmica quântica usando como substância de trabalho um dipolo magnético submetido a um campo magnético externo, isto é, um sistema quântico de dois níveis. Descrevemos as propriedades quânticas básicas de um sistema de dois níveis e determinamos grandezas termodinâmicas de estado como momento de dipolo magnético, energia interna e entropia. Determinamos também grandezas termodinâmicas de processo como calor e trabalho para três processos termodinâmicos distintos: processos isomagnético, isentrópico e isotérmico. Em uma próxima etapa, determinaremos a eficiência de uma máquina térmica quântica que opera em um ciclo formado por alguns destes processos termodinâmicos.

5. Referências

[1] MARTÍNEZ, I. A. et al. **Nature Physics** v.12, p.67, 2016.
[2] ROßNAGEL, J. et al. **Science** v.352, p.325, 2016.
[3] BASDEVANT, J.-L.; DALIBARD, J. **Quantum Mechanics**. Berlin: Springer, 2002.
[4] CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics.** 2.ed. New York: John Wiley, 1985.
[5] QUAN, H. T. **Physical Review E** v.79, p.041129, 2009.

Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI e ao CNPq pela concessão de uma bolsa de pesquisa de iniciação científica.

[1]Aluno de IC do Centro Universitário FEI e CNPq. Projeto com vigência de 02/17 a 01/18.