

# EFICIÊNCIA DO CICLO DE OTTO COM SISTEMAS QUÂNTICOS DE DOIS NÍVEIS

Thiago Velloso Cruz<sup>1</sup>, Roberto Baginski Batista Santos<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Universitário FEI

<sup>2</sup>Departamento de Física, Centro Universitário FEI  
thiago.575@hotmail.com; rsantos@fei.edu.br

**Resumo:** O projeto consiste em desenvolver teoricamente 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. Após a determinação das propriedades quânticas do sistema, grandezas termodinâmicas de estado e processo, iremos determinar a expressão para a eficiência da máquina operando em um ciclo de Otto quântico.

## 1. Introdução

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 para determinar a eficiência de uma máquina térmica quântica operando em um ciclo de Otto comparando assim, com a eficiência de Carnot.

## 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<sup>[3]</sup>

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

em que  $\gamma < 0$  é a razão giromagnética do sistema, escolhido como sendo um sistema que exhibe paramagnetismo eletrônico como  $\text{TiCl}_3$ ,  $\text{VCl}_4$  ou outros sais paramagnéticos. As energias possíveis para o sistema são os autovalores de  $H$  e são dadas por

$$E_{\pm} = \pm \frac{\hbar |\gamma| B}{2}, \quad (2)$$

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<sup>[4]</sup>

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

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

$$p_n = \frac{e^{-E_n/kT}}{Z} \quad (4)$$

O valor médio  $\langle X \rangle$  de uma grandeza termodinâmica  $X$  é calculado por

$$\langle X \rangle = \sum_n p_n X_n \quad (5)$$

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

$$U = \langle H \rangle = \sum_n p_n E_n, \quad (6)$$

uma variação infinitesimal  $dU$  da energia interna é dada por<sup>[5]</sup>

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

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

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

## 3. Resultados

Podemos então 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

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

o valor médio da energia ou a energia interna

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

a entropia  $S$  do sistema de dois níveis

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

A figura 1 representa o momento de dipolo magnético, a entropia e a probabilidade de ocupação em função de  $X$

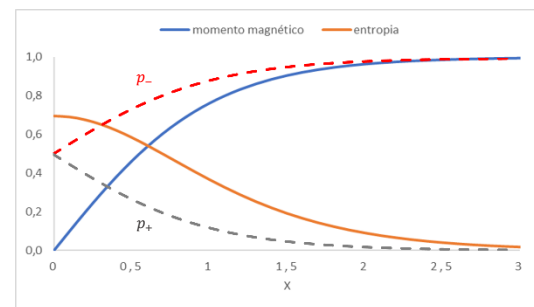


Figura 1. Gráficos de  $2\langle \mu_z \rangle / \hbar |\gamma|$  (momento magnético), de  $S/k$  (entropia) e probabilidade de ocupação em função de  $X = \hbar |\gamma| B / 2kT$

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 infinitesimal:

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

Sendo assim, podemos identificar alguns processos termodinâmicos, como o processo isomagnético, em que o campo magnético  $B$  é mantido constante,  $W = 0$  e

$$Q = -\frac{\hbar|\gamma|B}{2} \left( \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{2kT_f}\right) - \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B}{2kT_i}\right) \right) \quad (13)$$

No 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. Sendo a entropia  $S$  do sistema constante, ou seja, a razão  $B/T$  e o momento de dipolo magnético são mantidos constantes, temos  $Q = 0$  e

$$W = \frac{\hbar|\gamma|B}{2} \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_f}{2kT_f}\right) (B_f - B_i) \quad (14)$$

Neste processo isentrópico, 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, temos

$$\begin{cases} W = kT \ln\left(\frac{\cosh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_f}{2kT}\right)}{\cosh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_i}{2kT}\right)}\right) \\ Q = W - \frac{\hbar|\gamma|B}{2} \left( \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_f}{2kT}\right) - \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_i}{2kT}\right) \right) \end{cases} \quad (15)$$

É importante observar que 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

$$\Delta U = -\frac{\hbar|\gamma|B}{2} \left( \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_f}{2kT}\right) - \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_i}{2kT}\right) \right) \quad (16)$$

Com a determinação dos processos termodinâmicos realizados, podemos construir o análogo quântico do ciclo Otto, composto por dois processos isomagnéticos e dois isoentrópicos representados pela figura 2.

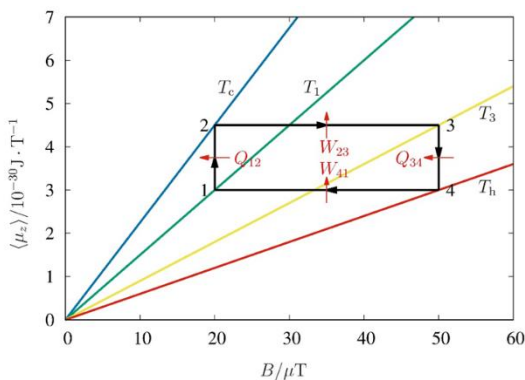


Figura 2. Representação de um ciclo de Otto quântico em um diagrama  $\langle \mu_z \rangle - B$

onde a temperatura do ciclo  $T_h > T_3 > T_1 > T_c$  e as intermediárias  $T_1$  e  $T_3$  são determinadas supondo que  $B_h = \alpha B_l$ , sendo  $\alpha > 1$  e  $T_h = \beta T_c$ , sendo  $\beta > 1$

$$\begin{cases} T_1 = \frac{\beta T_c}{\alpha} \\ T_3 = \frac{\alpha T_c}{\beta} \end{cases} \quad (17)$$

Para a determinação da eficiência da máquina térmica quântica que opera no ciclo de Otto, utilizaremos a seguinte equação

$$\varepsilon = \frac{W_{\text{ciclo}}}{Q_h} = \frac{(B_h - B_l) \left( \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_l}{2kT_c}\right) - \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_h}{2kT_h}\right) \right)}{B_h \left( \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_h}{2kT_3}\right) - \tanh\left(\frac{\hbar|\gamma|B_h}{2kT_h}\right) \right)} \quad (18)$$

Simplificando a equação (18) usando as relações (17) entre temperaturas extremas e os campos magnéticos, extremos do ciclo, obtemos

$$\varepsilon_{\text{otto}} = 1 - \frac{B_l}{B_h} \quad (19)$$

o que mostra que a eficiência da máquina térmica quântica não depende diretamente da temperatura, mas sim da razão entre o menor e o maior campo magnético aplicado. Podemos concluir também, a partir da equação (17) que

$$\frac{B_l}{B_h} > \frac{T_c}{T_h} \quad (20)$$

mostrando que a eficiência de uma máquina térmica quântica operando em um ciclo de Otto, sempre será menor que a eficiência de Carnot. Porém, como a razão magnética pode ser escolhida tão próxima quanto a razão de temperaturas, isso significa que uma máquina térmica quântica operando em um ciclo Otto pode ser quase tão eficiente quanto uma máquina clássica operando em um ciclo de Carnot.

## 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, determinamos também grandezas termodinâmicas de estado e processo para assim, determinar processos termodinâmicos como o isomagnético, isentrópico e isotérmico. Por fim, realizamos a construção de um análogo quântico do ciclo de Otto, comparando assim, sua eficiência com o ciclo de Carnot (eficiência máxima teórica).

## 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.

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