



EDUARDO LOPES DOS SANTOS

**MÁQUINA DE STIRLING QUÂNTICA BASEADA EM PONTOS
QUÂNTICOS DUPLOS COM CAMPO MAGNÉTICO NÃO
HOMOGÊNEO**

**LAVRAS – MG
2025**

EDUARDO LOPES DOS SANTOS

**MÁQUINA DE STIRLING QUÂNTICA BASEADA EM PONTOS QUÂNTICOS DUPLOS
COM CAMPO MAGNÉTICO NÃO HOMOGÊNEO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Física, para a obtenção do título de Mestre.

Prof. DSc. Moises Porfirio Rojas Levya
Orientador

Prof. DSc. Cleverson Filgueiras
Coorientador

**LAVRAS – MG
2025**

**Ficha Catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração
de Ficha Catalográfica da Biblioteca Universitária da UFLA, com
dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Santos, Eduardo Lopes dos.

Máquina de Stirling Quântica Baseada em Pontos Quânticos Duplos Com Campo
Magnético Não Homogêneo / Eduardo Lopes dos Santos. - 2025.
80 p. : il.

Orientador: Moises Levy

Coorientador: Cleverson Filgueiras

Dissertação (Mestrado Acadêmico) - Universidade Federal de Lavras, 2025.
Bibliografia.

1. Termodinâmica Quântica. 2. Máquinas Térmicas Quânticas. 3. Ciclo de Stirling.
4. Pontos Quânticos Duplos. 5. Campos Magnéticos Não Homogêneos. I. Levy,
Moises. II. Filgueiras, Cleverson. III. Universidade Federal de Lavras. IV. Título.

EDUARDO LOPES DOS SANTOS

**MÁQUINA DE STIRLING QUÂNTICA BASEADA EM PONTOS QUÂNTICOS DUPLOS
COM CAMPO MAGNÉTICO NÃO HOMOGÊNEO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Física, para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 29 de Setembro de 2025.

Prof. DSc. Moisés Porfirio Rojas Leyva UFLA
Prof. DSc. Onofre Rojas Santos UFLA
Prof. DSc. Saulo Luis Lima da Silva CEFET-MG

Prof. DSc. Moises Porfirio Rojas Levy
Orientador

Prof. DSc. Cleverson Filgueiras
Coorientador

**LAVRAS – MG
2025**

Dedico este trabalho à minha família, pelo perene apoio e incentivo.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. Agradeço também à Universidade Federal de Lavras (UFLA) pela estrutura e suporte oferecidos durante o desenvolvimento desta pesquisa. Expresso minha gratidão ao colega Bruno Carvalho, do curso de Engenharia Física, pelo companheirismo e pelas valiosas contribuições ao longo desta jornada. Estendo meus agradecimentos a todos os colegas de curso que estiveram ao meu lado nessa caminhada, compartilhando aprendizados, desafios e conquistas.

*"O que fazemos em vida, ecoa na eternidade."
(Marcus Aurelius)*

RESUMO

Esta dissertação realiza uma investigação sistemática do funcionamento de uma máquina térmica quântica baseada no ciclo de Stirling, implementada em um sistema de pontos quânticos duplos ocupados por um único elétron. O modelo considera uma diferença de energia por dessintonia, acoplamento por tunelamento, a presença de um campo magnético homogêneo na direção z e um gradiente de campo magnético na direção x , perpendicular ao primeiro. Analisamos os efeitos combinados do campo magnético e das temperaturas dos reservatórios térmicos (quente e frio) sobre as principais variáveis termodinâmicas: o calor absorvido, o calor dissipado e o trabalho realizado. A investigação abrange os diferentes modos operacionais da máquina de Stirling quântica, incluindo o motor térmico, o refrigerador, o aquecedor e o acelerador térmico.

Palavras-chave: Máquina térmica quântica; Pontos quânticos duplos; Ciclo de Stirling.

ABSTRACT

This dissertation presents a systematic investigation of the operation of a quantum heat engine based on the Stirling cycle, implemented in a double quantum dot system occupied by a single electron. The model considers energy detuning, tunneling coupling, a homogeneous magnetic field in the z -direction, and a magnetic field gradient in the x -direction. We analyze the combined effects of the magnetic field and the temperatures of the thermal reservoirs (hot and cold) on key thermodynamic quantities: absorbed heat, dissipated heat, and work output. The study explores the different operational modes of the quantum Stirling machine, including thermal engine, refrigerator, heater, and thermal accelerator.

Keywords: Quantum heat engine; Double quantum dots; Stirling cycle.

INDICADORES DE IMPACTO

Este trabalho promove avanços na compreensão do comportamento de máquinas térmicas quânticas, contribuindo para o desenvolvimento de tecnologias sustentáveis e eficientes em energia, com potencial impacto social ao fomentar a pesquisa e inovação na área de nanoóptica e nanotecnologia, especialmente na instalação de pontos quânticos como elementos de geração de energia. Os resultados podem influenciar políticas de pesquisa e inovação tecnológica no Brasil, com impacto direto em universidades, laboratórios e empresas do setor energético, beneficiando pesquisadores, estudantes, técnicos e a sociedade em geral. A potencial aplicação do modelo em dispositivos de alta eficiência energética representa uma contribuição para o desenvolvimento econômico nacional, alinhando-se aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável da ONU, especialmente os de energia limpa (ODS 7) e inovação (ODS 9). Os impactos sociais incluem a formação de mão de obra qualificada na área de física quântica e nanotecnologia, além da possibilidade de downstream na inovação de dispositivos de geração e conversão de energia, fortalecendo a posição do país na área de tecnologias emergentes. A abrangência do trabalho na temática de tecnologia e produção contribui para fortalecer a competitividade nacional, promovendo a transferência de conhecimentos e tecnologias para o setor produtivo, estimulando o desenvolvimento regional e potencializando ações extensionistas voltadas à difusão do conhecimento científico, com impacto potencial na capacitação de profissionais e na sensibilização de comunidades acerca da importância da energia sustentável.

IMPACT INDICATORS

his work advances the understanding of the behavior of quantum thermal machines, contributing to the development of sustainable and efficient energy technologies, with a social impact by fostering research and innovation in the fields of nano-optics and nanotechnology, particularly through the use of quantum dots as energy-generating components. The results have the potential to influence research and technological innovation policies in Brazil, with direct benefits to universities, laboratories, and energy sector companies, ultimately benefiting researchers, students, technicians, and society at large. The potential application of the model in highly efficient energy devices represents a contribution to the country's economic development, aligning with the United Nations Sustainable Development Goals, especially SDG 7 (Affordable and Clean Energy) and SDG 9 (Industry, Innovation, and Infrastructure). The social impacts include the training of qualified personnel in quantum physics and nanotechnology, as well as downstream innovations in energy generation and conversion devices, strengthening the national position in emerging technologies. The work's focus on technology and production themes contributes to enhancing national competitiveness by promoting knowledge and technology transfer to the productive sector, stimulating regional development, and supporting extension activities aimed at disseminating scientific knowledge, with the potential to impact community awareness regarding the importance of sustainable energy.

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 – Característica do trabalho e calor permitidos pela segunda lei da termodinâmica.

O sinal (+) indica trabalho realizado pelo sistema e calor absorvido; (–) indica trabalho realizado sobre o sistema e calor liberado. Notas: W_{net} = trabalho líquido;

Q_{in} = calor recebido pelo sistema; Q_{out} = calor cedido pelo sistema. 57

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Esquema ilustrativo de um bit clássico e de um qubit, bem como suas combinações de estados.	19
Figura 2.2 – Representação de subconjuntos entre coerência quântica, correlação quântica e emaranhamento. O emaranhamento está contido dentro da correlação quântica, que por sua vez está dentro da coerência quântica.	22
Figura 2.3 – Representação esquemática do emaranhamento quântico entre dois spins. Quando um dos sistemas (esfera azul) é medido na direção do eixo z , o estado do outro sistema (esfera vermelha) torna-se correlacionado ao resultado da medição, de modo que se o primeiro spin for encontrado $+z$, o segundo estará $-z$, e vice-versa, independentemente da distância entre eles. As setas curvas indicam os possíveis estados de rotação (up/down), enquanto a linha ondulada simboliza a correlação quântica não local que conecta as partículas.	23
Figura 3.1 – Pontos Quânticos por comprimento de onda. Aqui a magnitude da energia de condução é inversamente proporcional ao tamanho do ponto.	28
Figura 3.2 – Representação esquemática de um ponto quântico duplo, onde dois elétrons estão confinados em dois poços de potencial localizados nas posições a_1 e a_2 . As setas azuis indicam os spins dos elétrons, enquanto a amplitude de tunelamento, representa a possibilidade de transição entre os poços por efeito túnel. A diferença de energia $\Delta\epsilon$ indica o desalinhamento dos níveis fundamentais, e U representa a energia de repulsão de Coulomb associada à ocupação dupla de um mesmo ponto quântico.	29
Figura 4.1 – Representação esquemática do ciclo quântico fechado a,b,c,d.	32
Figura 4.2 – Representação gráfica do Ciclo de Carnot.	35
Figura 4.3 – Representação gráfica do ciclo de Carnot quântico em um sistema de dois níveis.	36
Figura 4.4 – Representação gráfica do Ciclo de Stirling.	39
Figura 4.5 – Representação do Ciclo de Stirling Quântico baseado em um sistema magnético. As curvas delimitadas por B_1 e B_2 indicam diferentes estados do sistema para campos magnéticos distintos. As setas verdes indicam o sentido do ciclo termodinâmico.	40

Figura 4.6 – Representação de um regenerador atuando no Ciclo de Stirling.	43
Figura 5.1 – Spin do elétron confinado em dois pontos quânticos acoplados com um campo magnético homogêneo em B_z e um gradiente perpendicular de campo magnético em B_x . Considera-se um desnível energético no sistema, propiciando eventuais tunelamentos.	46
Figura 6.1 – Curvas das energias E_n ($n = 1, 2, 3, 4$) em função do desnível energético ε . (a) Parâmetros teóricos: $B_z = 16 \mu\text{eV}$, $t = 7 \mu\text{eV}$, com $B_x = 100 \mu\text{eV}$ (contínuo) e $B_x = 0$ (tracejado). (b) Parâmetros experimentais: $B_z = 24 \mu\text{eV}$, $t = 15,4 \mu\text{eV}$, com $B_x = 10 \mu\text{eV}$ (contínuo) e $B_x = 0$ (tracejado).	59
Figura 6.2 – Populações em função da temperatura para $\varepsilon = 2.0 \mu\text{eV}$, com $B_z = 24 \mu\text{eV}$, $B_x = 100 \mu\text{eV}$, $t = 10 \mu\text{eV}$	61
Figura 6.3 – Populações em função da temperatura para $\varepsilon = 0.5 \mu\text{eV}$, com $B_z = 24 \mu\text{eV}$, $B_x = 100 \mu\text{eV}$, $t = 10 \mu\text{eV}$	61
Figura 6.4 – Modos operacionais do ciclo de Stirling quântico no plano $(B_{z,0}, B_{z,1})$ para diferentes configurações de parâmetros. (a) Para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$. (b) Para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$. (c) Para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$. (d) Para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$. Os parâmetros fixos são $\varepsilon = 1 \mu\text{eV}$ e $t = 15.4 \mu\text{eV}$	63
Figura 6.5 – Representação esquemática da eficiência térmica do ciclo de Stirling quântico no espaço de parâmetros $B_{z,0} - B_{z,1}$ para diferentes configurações. (a) $B_x = 10, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2, \mu\text{eV}$. (b) $B_x = 10, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6, \mu\text{eV}$. (c) $B_x = 60, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2, \mu\text{eV}$. (d) $B_x = 60, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6, \mu\text{eV}$. Os parâmetros fixos do sistema são $\varepsilon = 1, \mu\text{eV}$ e $t = 15.4, \mu\text{eV}$. . .	65
Figura 6.6 – Modos operacionais do ciclo de Stirling quântico com regenerador no plano $(B_{z,0}, B_{z,1})$ para diferentes configurações de parâmetros. (a) Para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$. (b) Para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$. (c) Para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$. (d) Para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$. Os parâmetros fixos são $\varepsilon = 1 \mu\text{eV}$ e $t = 15.4 \mu\text{eV}$	68

Figura 6.7 – Eficiência térmica do ciclo de Stirling quântico com regenerador no espaço de parâmetros $B_{z,0} - B_{z,1}$ para diferentes configurações. (a) $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$. (b) $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$. (c) $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$. (d) $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$. Os parâmetros fixos do sistema são $\varepsilon = 1 \mu\text{eV}$ e $t = 15.4 \mu\text{eV}$ 70

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
2	FUNDAMENTOS DA INFORMAÇÃO QUÂNTICA	17
2.1	Espaço de Hilbert	17
2.2	Qubits	18
2.3	Operador Densidade	19
2.3.1	Estado Puro	20
2.3.2	Estado Misto	20
2.4	Qubits e a Coerência Quântica	21
2.5	Emaranhamento Quântico	23
2.6	Estados de Bell	24
2.7	Entropia de Von Neumann	25
3	PONTOS QUÂNTICOS	27
3.1	Propriedades dos Pontos Quânticos	27
3.2	Pontos Quânticos Duplos	28
4	MÁQUINAS TÉRMICAS CLÁSSICAS E QUÂNTICAS	30
4.1	A Primeira Lei da Termodinâmica	30
4.1.1	A Primeira Lei da Termodinâmica na Física Clássica	30
4.1.2	A Primeira Lei da Termodinâmica em Sistemas Quânticos Fechados e Independentes do Tempo	31
4.2	Segunda Lei da Termodinâmica	33
4.3	Ciclos Termodinâmicos	34
4.3.1	Ciclo de Carnot	34
4.3.1.1	O Ciclo de Carnot Quântico	36
4.3.2	Ciclo de Stirling	38
4.3.2.1	O Ciclo de Stirling Clássico	38
4.3.2.2	O Ciclo de Stirling Quântico	40
4.4	Máquina de Stirling Quântica: Implementação do Regenerador	43

4.4.1	Ciclo Sem Regenerador	44
4.4.2	Ciclo Com Regenerador	44
5	O MODELO	45
5.1	Spin do Elétron em um Ponto Quântico Duplo com Campo Magnético Transversal	45
5.1.1	Operador Densidade Térmico	51
5.1.2	Entropia Von Neumann do Sistema	52
5.1.3	Fluxos de Calor do Ciclo Térmico	54
5.1.4	Trabalho do Sistema	55
5.2	Eficiência da Máquina Térmica Quântica e o Limite de Carnot	55
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO	58
6.1	Energias Próprias	58
6.2	Populações	59
6.3	Ciclo sem Regenerador	62
6.3.1	Análise dos Modos Operacionais do Ciclo de Stirling Quântico sem Regenerador .	62
6.3.2	Mapas de Eficiência do Ciclo de Stirling Quântico sem Regenerador	64
6.4	Ciclo com Regenerador	67
6.4.1	Análise dos Modos Operacionais do Ciclo de Stirling Quântico com Regenerador .	67
6.4.2	Mapas de Eficiência do Ciclo de Stirling Quântico com Regenerador	69
7	CONCLUSÕES	73
	REFERÊNCIAS	74

1 INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, áreas emergentes da Física, como Computação e Informação Quântica, têm crescido exponencialmente, especialmente após Feynman destacar que sistemas clássicos são ineficientes para modelar sistemas quânticos, sendo necessários sistemas quânticos para simulações realistas (FEYNMAN, 1982). Nesse contexto, a termodinâmica de sistemas quânticos tem ganhado relevância, particularmente na análise de máquinas térmicas baseadas em sistemas com poucos graus de liberdade, como pontos quânticos, nos quais fenômenos como superposição e emaranhamento oferecem uma perspectiva inédita sobre os limites da conversão de energia em escalas nanoscópicas (BENITO et al., 2017) e permitem implementar ciclos térmicos quânticos, como o Stirling (HUANG et al., 2014).

A termodinâmica quântica investiga a interação entre os princípios da termodinâmica e a mecânica quântica, explorando como coerência, emaranhamento e dinâmicas fora do equilíbrio afetam processos termodinâmicos e o desempenho de máquinas térmicas (BINDER et al., 2018; KOSLOFF, 2013; DEFFNER; CAMPBELL, 2019). Sistemas quânticos como spins, osciladores harmônicos, gases quânticos e pontos quânticos exibem comportamentos distintos dos clássicos, oferecendo novos mecanismos e potencial para maior eficiência. Avanços recentes mostram que motores e refrigeradores quânticos podem explorar coerência na base de energia, ergotropia e reservatórios não térmicos, superando limites clássicos e aprofundando a compreensão das conexões entre mecânica estatística, termodinâmica e informação quântica (KOSLOFF, 2013; BINDER et al., 2018; DEFFNER; CAMPBELL, 2019).

Diante desse panorama, esta dissertação visa investigar o comportamento termodinâmico de um único elétron confinado em um ponto quântico duplo sob a influência de um campo magnético transversal, modelando uma máquina térmica quântica operando pelo ciclo de Stirling, com atenção especial à coerência, tunelamento e variação da entropia em função dos parâmetros externos.

No capítulo 2, são apresentados os fundamentos da informação quântica, começando pelo espaço de Hilbert e a representação de estados quânticos, seguido pela definição de qubits, operador densidade, estados puros e mistos, coerência quântica, emaranhamento e entropia de Von Neumann. Esses conceitos são essenciais para compreender a base teórica do sistema estudado. O capítulo 3 trata dos pontos quânticos, abordando suas propriedades físicas e, em especial, os pontos quânticos duplos, que são os

elementos centrais do modelo proposto. São discutidos aspectos como confinamento eletrônico, tunelamento entre poços de potencial e a influência de campos magnéticos.

No capítulo 4, o foco se volta para as máquinas térmicas clássicas e quânticas. São revisadas a primeira e a segunda leis da termodinâmica, os ciclos de Carnot e Stirling em suas versões clássica e quântica, e o papel do regenerador na otimização do ciclo de Stirling. Este capítulo estabelece o arcabouço termodinâmico necessário para a análise do sistema. O capítulo 5 apresenta o modelo físico da máquina térmica quântica, incluindo a formulação do Hamiltoniano do sistema, a construção da matriz densidade térmica, o cálculo da entropia de Von Neumann, os fluxos de calor, o trabalho realizado e a eficiência da máquina.

No capítulo 6, são discutidos os resultados obtidos por meio de simulações numéricas. São analisadas as curvas de energia em função dos parâmetros magnéticos, as populações térmicas, os modos operacionais do ciclo de Stirling quântico, como motor térmico, refrigerador, aquecedor e acelerador térmico e os mapas de eficiência, tanto com quanto sem o uso de regenerador. Por fim, o capítulo 7 apresenta as conclusões do trabalho, destacando os principais achados e propondo perspectivas para estudos futuros, como a implementação experimental do modelo e a investigação de novos regimes quânticos de operação.

2 FUNDAMENTOS DA INFORMAÇÃO QUÂNTICA

Neste capítulo, são apresentados os conceitos centrais da mecânica quântica e da informação quântica necessários para o estudo de qubits e emaranhamento. Inicialmente, discute-se o espaço de Hilbert e a representação de estados quânticos, seguida da introdução aos qubits e à coerência quântica. Em seguida, aborda-se o operador densidade, estados puros e mistos, e suas correlações quânticas. O capítulo prossegue com o emaranhamento quântico, incluindo os estados de Bell, e finaliza com a entropia de Von Neumann, destacando seu papel na quantificação do emaranhamento e na termodinâmica quântica.

2.1 Espaço de Hilbert

O espaço de Hilbert é uma construção fundamental em várias áreas da física, especialmente na mecânica quântica. Trata-se de um espaço vetorial completo, com um produto interno, que pode ser utilizado para descrever estados quânticos e operações sobre esses estados. Um dos aspectos mais importantes é que ele fornece uma estrutura matemática rigorosa para lidar com superposições e medições, conceitos centrais na física quântica (SAKURAI, 1994).

Formalmente, um espaço de Hilbert é um conjunto de vetores (ou estados) $|\psi\rangle$ em que o produto interno é denotado como $\langle\psi|\psi\rangle$. Este produto interno satisfaz propriedades como linearidade, simetria conjugada e positividade. Logo, qualquer sequência de vetores ortogonais no espaço pode ser expandida para representar qualquer vetor no espaço (KEÇECI, 2025; SAKURAI, 1994).

Em mecânica quântica, o espaço de Hilbert é utilizado para representar os estados dos sistemas quânticos. As observações ou medições do sistema são descritas por operadores que atuam nesse espaço. Para um sistema de partículas, por exemplo, o estado quântico pode ser representado por um vetor de estado $|\psi\rangle$. A probabilidade total de encontrar o sistema em algum estado deve ser igual a 1, o que implica que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Essa condição requer o processo de normalização do vetor de estado, de modo a garantir a correta interpretação física (KEÇECI, 2025; SAKURAI, 1994).

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = 1. \quad (2.1)$$

O formalismo de representação de estados por vetores $|\psi\rangle$ e funcionais de bras $\langle\psi|$, conhecido como notação braket, foi introduzido por Dirac em sua formulação da mecânica quântica (DIRAC, 1930a). Para sistemas compostos, o espaço de Hilbert total é obtido pelo produto tensorial dos espaços de Hilbert de cada subsistema, isto é,

$$\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B, \quad (2.2)$$

o que permite descrever correlações e fenômenos não locais, como o emaranhamento quântico (KEÇEÇI, 2025).

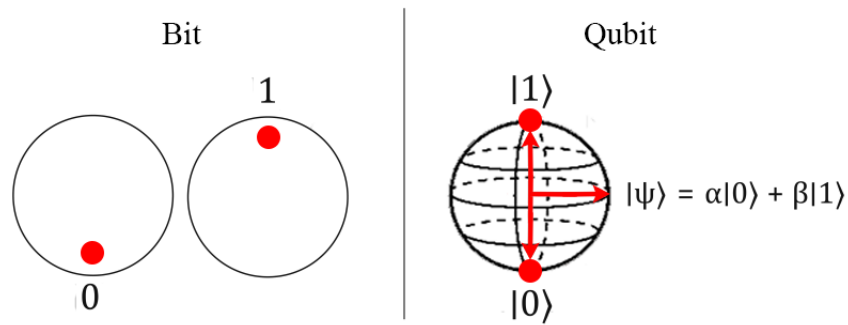
2.2 Qubits

O conceito de qubit, ou bit quântico, é fundamental para a informação quântica e tem suas raízes em várias contribuições históricas importantes no campo da física quântica. O termo "qubit" foi introduzido pelo físico Benjamin Schumacher em 1995. Schumacher formalizou a ideia de um qubit como a unidade básica de informação em sistemas de computação quântica. Em seu artigo "Quantum Coding", Schumacher descreveu como os qubits poderiam ser usados para codificar e processar informações, estabelecendo as bases teóricas para a computação quântica e a informação quântica (SCHUMACHER; WESTMORELAND; WOOTTERS, 1996). Seu trabalho permitiu a formalização da computação quântica, abrindo o caminho para desenvolvimentos futuros na área.

Antes de Schumacher, o conceito de qubit estava implícito nas discussões sobre a mecânica quântica e está intrinsecamente ligado à habilidade dos sistemas quânticos de estarem em superposição de estados. Na computação clássica, um bit pode estar em um dos dois estados, $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ (Figura 2.1). No entanto, na mecânica quântica, um qubit pode estar em uma combinação linear dos estados, o que permite a realização de operações simultâneas em múltiplos estados, um fenômeno conhecido como paralelismo quântico. Esta ideia foi formalizada por Schumacher e outros, que demonstraram como a manipulação desses estados quânticos poderia ser utilizada para realizar cálculos de forma mais eficiente que os métodos clássicos (SCHUMACHER; WESTMORELAND; WOOTTERS, 1996).

Diferente de um bit clássico, um qubit pode estar em uma superposição linear dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$, representada matematicamente como:

Figura 2.1 – Esquema ilustrativo de um bit clássico e de um qubit, bem como suas combinações de estados.



Fonte: (HUSSAIN; TALIB, 2016) Modificado pelo autor.

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle. \quad (2.3)$$

onde $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, são coeficientes complexos que satisfazem a condição de normalização $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Essa característica permite que o qubit realize operações em paralelo, proporcionando um ganho exponencial de capacidade em certas tarefas computacionais (HUSSAIN; TALIB, 2016).

Além da superposição, dois ou mais qubits apresentam fenômenos como correlações quânticas, entre elas o emaranhamento, cruciais para a implementação de algoritmos quânticos. Por exemplo, quando dois ou mais qubits estão em um estado emaranhado, suas descrições individuais tornam-se inseparáveis, levando a uma correlação quântica que não possui equivalente clássico. Uma base matemática para descrever qubits e suas interações é o formalismo de espaços de Hilbert, onde cada qubit é um vetor em um espaço vetorial bidimensional. (HORODECKI et al., 2009).

2.3 Operador Densidade

O operador densidade é uma ferramenta fundamental na mecânica quântica para descrever o estado de sistemas quânticos, sejam eles puros ou mistos. Ele permite representar tanto a informação completa de um sistema isolado quanto a descrição estatística de sistemas com incerteza ou que fazem parte de sistemas maiores (SAKURAI, 1994).

2.3.1 Estado Puro

Um sistema quântico em estado puro é descrito por um vetor de estado $|\psi\rangle$ no espaço de Hilbert (HAAR, 1961). Para um sistema de dois níveis, por exemplo, esse vetor pode ser escrito como uma superposição dos estados base $|0\rangle$ e $|1\rangle$:

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle, \quad (2.4)$$

onde $c_0, c_1 \in \mathbb{C}$ e $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$.

A matriz densidade associada a esse estado puro é dada por

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{bmatrix} |c_0|^2 & c_0c_1^* \\ c_1c_0^* & |c_1|^2 \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Nesse caso, o sistema está completamente definido e coerente, e os elementos fora da diagonal representam a coerência quântica entre os estados base (HAAR, 1961).

Para que ρ represente um estado puro, ele deve satisfazer as seguintes condições:

1. $\rho = \rho^\dagger$;
2. $\text{Tr}(\rho) = 1$;
3. $\rho^2 = \rho$;
4. $\text{Tr}(\rho^2) = 1$;
5. $\rho > 0$.

2.3.2 Estado Misto

Um estado misto representa uma incerteza estatística sobre o estado quântico do sistema. Ele é descrito por uma combinação probabilística de diferentes estados puros $|\psi_i\rangle$, com probabilidades p_i :

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (2.6)$$

com $0 \leq p_i \leq 1$ e $\sum_i p_i = 1$.

Diferente de um estado puro, a matriz densidade de um estado misto não corresponde a um único vetor de estado (HAAR, 1961). Um exemplo importante é o estado completamente misto de um qubit:

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.7)$$

Este operador representa máxima incerteza sobre o estado do sistema e ausência total de coerência quântica, como evidenciado pelos elementos nulos fora da diagonal (HAAR, 1961).

As condições para que ρ represente um estado misto físico válido são:

1. $\rho = \rho^\dagger$;
2. $\text{Tr}(\rho) = 1$;
3. $\rho^2 \neq \rho$;
4. $\text{Tr}(\rho^2) < 1$;
5. $\rho > 0$.

No tópico subsequente, estudaremos a coerência quântica, fenômeno que está diretamente relacionado à estrutura do operador densidade, particularmente aos elementos fora da diagonal e suas propriedades. Abordaremos-a quando observada em bits quânticos (HORODECKI et al., 2009).

2.4 Qubits e a Coerência Quântica

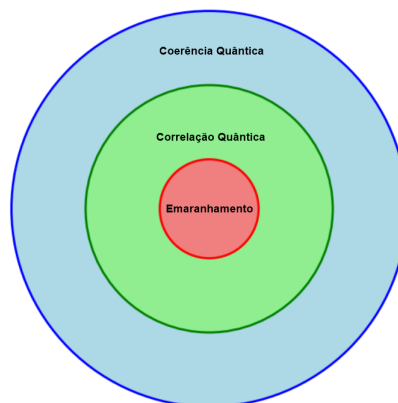
Em qubits, a coerência quântica refere-se à capacidade de manter superposições quânticas entre seus estados base $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Essa propriedade é essencial para o processamento de informação quântica, pois permite que os qubits realizem computação paralela e interfiram entre si de maneira controlada. A coerência é geralmente representada pela presença de elementos não nulos fora da diagonal na matriz densidade do qubit em uma base escolhida (HORODECKI et al., 2009).

A coerência quântica é a propriedade mais geral, relacionada ao princípio de superposição, mas depende explicitamente da base escolhida para a representação dos estados quânticos (BAUMGRATZ;

CRAMER; PLENIO, 2014; STRELTISOV; ADESSO; PLENIO, 2017). A correlação quântica, considerada um subconjunto da coerência, inclui efeitos como a discordância quântica (OLLIVIER; ZUREK, 2001). O emaranhamento, por sua vez, constitui um subconjunto ainda mais restrito das correlações quânticas, caracterizando estados que não podem ser decompostos em subsistemas independentes (HORODECKI et al., 2009).

É importante destacar que podem existir estados emaranhados que não apresentam coerência local em uma base específica, como a base computacional (formada pelos autovetores de σ_z). Isso ocorre porque a coerência, diferentemente do emaranhamento, não é uma propriedade absoluta do estado, mas sim relativa à escolha da base de referência. Assim, todo estado emaranhado possui coerência global em alguma base e apresenta correlação quântica, mas nem toda coerência implica correlação, e nem toda correlação implica emaranhamento (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014; STRELTISOV; ADESSO; PLENIO, 2017).

Figura 2.2 – Representação de subconjuntos entre coerência quântica, correlação quântica e emaranhamento. O emaranhamento está contido dentro da correlação quântica, que por sua vez está dentro da coerência quântica.



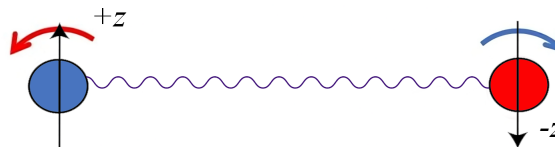
Fonte: Autor

No próximo tópico, exploramos em detalhes as propriedades do emaranhamento, seus critérios de detecção e sua relevância na manipulação da informação quântica (HORODECKI et al., 2009).

2.5 Emaranhamento Quântico

O emaranhamento quântico é um dos fenômenos mais fascinantes e fundamentais da mecânica quântica. Refere-se a uma situação em que os estados quânticos de duas ou mais partículas tornam-se interdependentes, de modo que o estado completo do sistema não pode ser descrito como o produto dos estados das partículas individuais (FERREIRA; ROJAS; ROJAS, 2023; DAHBI et al., 2023; FILGUEIRAS; ROJAS; ROJAS, 2020). Em outras palavras, mesmo que as partículas estejam separadas por grandes distâncias, as medições realizadas em uma partícula numa determinada coordenada z afetam imediatamente o estado da outra, (como ilustrado na Figura 2.3), uma propriedade que Einstein, Podolsky e Rosen (EPR) descreveram como uma "ação fantasmagórica à distância" (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935).

Figura 2.3 – Representação esquemática do emaranhamento quântico entre dois spins. Quando um dos sistemas (esfera azul) é medido na direção do eixo z , o estado do outro sistema (esfera vermelha) torna-se correlacionado ao resultado da medição, de modo que se o primeiro spin for encontrado $+z$, o segundo estará $-z$, e vice-versa, independentemente da distância entre eles. As setas curvas indicam os possíveis estados de rotação (up/down), enquanto a linha ondulada simboliza a correlação quântica não local que conecta as partículas.



Fonte: Autor.

O emaranhamento surge quando aplicamos o princípio da superposição a sistemas físicos compostos de forma que o estado conjunto não possa ser fatorado em produtos de estados individuais dos subsistemas (HORODECKI et al., 2009; FRIIS, 2019). Em sistemas multipartidos, o emaranhamento pode ser classificado pelo número de subsistemas que estão correlacionados de forma não separável (FERREIRA; ROJAS; ROJAS, 2023). Esses conceitos foram formalizados na década de 1930, especialmente por Erwin Schrödinger, que introduziu o termo *Verschränkung* e discutiu suas implicações fundamentais logo após o artigo EPR (SCHRÖDINGER, 1935).

Matematicamente, o emaranhamento quântico é descrito no formalismo de espaços de Hilbert, nos quais o estado de um sistema composto é representado pelo produto tensorial dos espaços associados

a cada subsistema (HORODECKI et al., 2009; FRIIS, 2019). Para um sistema formado por duas partículas A e B , com espaços de Hilbert $\mathcal{H}_A$ e $\mathcal{H}_B$, o estado conjunto pertence ao espaço da expressão (2.2). Diz-se que o estado vetorial $|\Psi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}_{AB}$ é emaranhado se não puder ser escrito como um produto de estados individuais, isto é, se não existir uma fatoração da forma:

$$|\Psi_{AB}\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle. \quad (2.8)$$

Em contrapartida, se tal decomposição é possível, o estado é denominado separável. Assim, o emaranhamento caracteriza correlações quânticas que não podem ser explicadas por descrições locais e independentes dos subsistemas, sendo uma das propriedades fundamentais que distinguem a informação quântica da clássica (HORODECKI et al., 2009; FRIIS, 2019).

Essa formulação foi cristalizada por Paul Dirac, com sua notação bra-ket e a formulação abstrata em espaço de Hilbert, e pela obra rigorosa de John von Neumann (1932), que estabeleceu os axiomas da mecânica quântica nesse formalismo (DIRAC, 1930b; NEUMANN, 1932).

Por exemplo, um estado emaranhado de dois qubits pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |00\rangle + |11\rangle. \quad (2.9)$$

Este é um estado conhecido como estado de Bell, um dos exemplos mais simples e importantes de emaranhamento. O resultado obtido em um qubit fornece informações sobre o resultado esperado no outro, mas a determinação exata depende da base escolhida para a medida (BELL, 1964). A correlação perfeita entre os qubits existe apenas quando as medições são realizadas em bases correspondentes. Se as bases de medição forem diferentes, os resultados ainda podem apresentar alguma correlação, mas esta não será perfeita, dependendo do ângulo entre as bases escolhidas (HORODECKI et al., 2009).

2.6 Estados de Bell

Os estados de Bell são exemplos fundamentais de estados maximamente emaranhados, amplamente utilizados para explorar as propriedades e aplicações do emaranhamento quântico (BAYERBACH et al., 2023). Eles representam os estados quânticos de dois qubits em que a correlação entre os qubits é

máxima e inseparável, tornando-os centrais para estudos de computação quântica, criptografia quântica e fundamentos da teoria quântica (BELL, 1964).

Matematicamente, os estados de Bell são descritos como:

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle), \\ |\Phi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle), \\ |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle), \\ |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle - |10\rangle). \end{aligned} \tag{2.10}$$

Esses estados formam uma base completa para o espaço de Hilbert de dois qubits e possuem propriedades notáveis, como a invariância sob rotações globais e a violação de desigualdades de Bell, que são desigualdades clássicas utilizadas para testar a não-localidade quântica. (BELL, 1964).

2.7 Entropia de Von Neumann

A entropia de Von Neumann é crucial para quantificar correlações quânticas e clássicas, como o emaranhamento entre subsistemas (MAZIERO, 2015). É uma medida de desordem ou incerteza em sistemas quânticos, sendo uma extensão da entropia de Shannon para sistemas descritos por estados mistos (MAZIERO, 2015). Para um sistema com matriz densidade ρ , a entropia de Von Neumann é definida como:

$$S = -k_B \text{Tr}(\rho \ln \rho), \tag{2.11}$$

onde Tr é o traço calculado sobre todos os estados do sistema, $p_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$ representam as probabilidades de ocupação dos estados E_n do sistema, Z é a função de partição e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, onde $k_B \approx 1.380649 \times 10^{-23}$ J/K representa a constante de Boltzmann, que estabelece a ponte entre as quantidades macroscópicas da termodinâmica (temperatura e energia) e as quantidades microscópicas da mecânica estatística, como energia por partícula ou por grau de liberdade (ALICKI, 1979).

Para um estado puro $|\psi\rangle$, onde $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$, a entropia de Von Neumann é zero ($S = 0$), indicando que não há incerteza associada ao estado do sistema. Em contrapartida, nos estados mistos (com

combinações probabilísticas de diferentes estados quânticos), ($S > 0$), refletindo a presença de desordem ou incerteza no sistema (MAZIERO, 2015).

Para quantificar o emaranhamento em sistemas bipartidos, em um sistema total AB , o grau de emaranhamento pode ser medido pela entropia de Von Neumann de uma das partes:

$$S_A = -k_B \text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A), \quad (2.12)$$

onde $\rho_A = \text{Tr}_B(\rho_{AB})$ é a matriz densidade reduzida do subsistema A , obtida ao realizar traço parcial sobre o subsistema B . Esse procedimento remove as informações referentes a B , de modo que ρ_A descreve completamente a estatística de medidas realizadas apenas em A , incorporando efeitos do emaranhamento com B .

Na termodinâmica quântica, a entropia de Von Neumann é usada para descrever processos irreversíveis e a evolução de sistemas quânticos interagindo com reservatórios térmicos (MAZIERO, 2015). Ela será fundamental para estudar a eficiência de máquinas térmicas no ciclo Stirling quântico aplicado a pontos quânticos duplos, conforme proposto nesta monografia.

3 PONTOS QUÂNTICOS

Pontos quânticos são semicondutores nanoestruturados que se destacam como sistemas fundamentais para estudos em nanotecnologia, Computação e Informação Quântica. Louis E. Brus (BRUS, 1984) demonstrou que o confinamento quântico em nanocristais altera o estado excitado mais baixo, enquanto Alexei Ekimov et al. (EKIMOV; EFROS; ONUSHCHENKO, 1985) observaram efeitos similares em microcristais semicondutores.

Toshiya Fujisawa e colaboradores investigaram transporte eletrônico, tunelamento e relaxação energética em pontos quânticos (FUJISAWA et al., 1998), além de coerência, decoerência e controle coerente de estados de carga em pontos quânticos duplos, viabilizando operações lógicas em qubits de carga (FUJISAWA; TOKURA; HIRAYAMA, 2002; HAYASHI et al., 2003).

Neste capítulo, abordaremos as propriedades fundamentais dos pontos quânticos isolados e exploraremos os pontos quânticos duplos, destacando suas características eletrônicas, ópticas e quânticas, bem como seu papel em sistemas quânticos acoplados.

3.1 Propriedades dos Pontos Quânticos

Os Pontos Quânticos (Quantum Dots — QDs) são nanoestruturas semicondutoras, com dimensões da ordem de 10^{-9} metros, capazes de confinar portadores de carga (elétrons e lacunas) em todas as três dimensões espaciais. Esse confinamento tridimensional resulta em níveis de energia quantizados, conferindo aos QDs propriedades análogas às de átomos, o que lhes rendeu o apelido de "átomos artificiais" (BRUS, 1984).

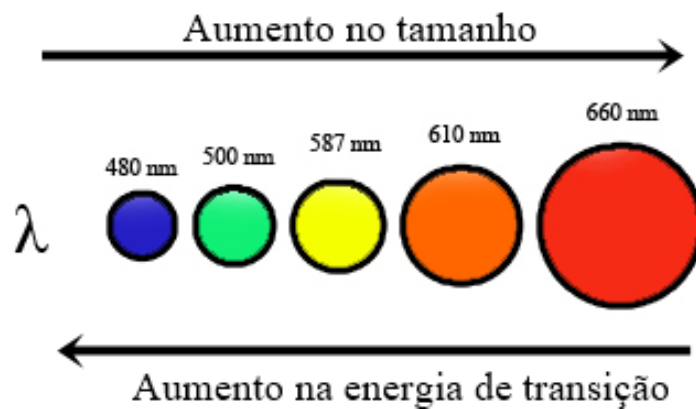
Devido ao seu tamanho nanoscópico, os QDs exibem comportamento essencialmente quântico, com os níveis de energia dependentes do número de átomos e do tamanho da estrutura. À medida que os átomos se aproximam, os níveis discretos se fundem, formando bandas de energia, como ocorre nos sólidos macroscópicos (CHAVES, 2011).

A principal consequência do confinamento é a dependência entre o tamanho do ponto quântico e a energia dos estados eletrônicos. QDs menores possuem maior energia de confinamento, resultando em maiores separações entre os níveis de energia e, portanto, em emissão de luz com menor comprimento

de onda (mais azul). Já QDs maiores emitem em comprimentos de onda maiores (mais vermelhos) (EKIMOV; EFROS; ONUSHCHENKO, 1985).

Essa capacidade de emitir luz em diferentes cores ao serem excitados os torna promissores em diversas aplicações tecnológicas, incluindo displays, células solares, biomedicina e computação quântica.

Figura 3.1 – Pontos Quânticos por comprimento de onda. Aqui a magnitude da energia de condução é inversamente proporcional ao tamanho do ponto.



Fonte: Autor.

3.2 Pontos Quânticos Duplos

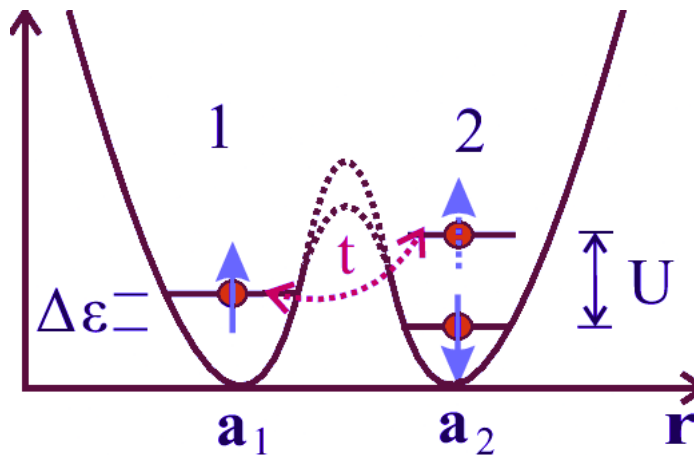
Pontos quânticos duplos (DQDs) são sistemas nanoestruturados nos quais dois potenciais confinantes próximos controlam a localização e o acoplamento de portadores de carga, como elétrons. Esses sistemas têm grande interesse na computação quântica, pois permitem a manipulação de estados de spin, essenciais para a implementação de qubits baseados em spins eletrônicos (PETTA et al., 2005).

No artigo Coherent Manipulation of Coupled Electron Spins in Semiconductor Quantum Dots, Petta et al. (PETTA et al., 2005) exploram a dinâmica do acoplamento de spins em DQDs, demonstrando que a interação entre os elétrons confinados pode ser controlada com alta precisão. Esse controle é obtido através da aplicação de pulsos elétricos e magnéticos, possibilitando a manipulação coerente dos estados quânticos do sistema.

Uma das características fundamentais dos pontos quânticos duplos é a possibilidade de ajustar a interação entre os spins dos elétrons confinados por meio da troca de spin (exchange interaction).

Esse mecanismo permite a realização de operações lógicas quânticas, como a porta SWAP, que troca os estados de spin de dois qubits (PETTA et al., 2005). Além disso, a separação controlada dos pontos quânticos pode reduzir a decoerência, aumentando o tempo de coerência quântica, um fator crucial para a viabilidade dos qubits de spin.

Figura 3.2 – Representação esquemática de um ponto quântico duplo, onde dois elétrons estão confinados em dois poços de potencial localizados nas posições a_1 e a_2 . As setas azuis indicam os spins dos elétrons, enquanto a amplitude de tunelamento, representa a possibilidade de transição entre os poços por efeito túnel. A diferença de energia $\Delta\epsilon$ indica o desalinhamento dos níveis fundamentais, e U representa a energia de repulsão de Coulomb associada à ocupação dupla de um mesmo ponto quântico.



Fonte: (LI; HU; YOU, 2012). Modificado pelo autor.

A manipulação coerente dos spins em pontos quânticos duplos abre caminho para a implementação de portas lógicas quânticas escaláveis, sendo um dos principais avanços na construção de processadores quânticos baseados em semicondutores. Estudos experimentais indicam que a fidelidade dessas operações pode ser aumentada com a utilização de campos magnéticos controlados e técnicas de ressonância magnética de spin eletrônico (Electron Spin Resonance – ESR), tornando os DQDs promissores para o desenvolvimento de tecnologia quântica em larga escala (PETTA et al., 2005).

4 MÁQUINAS TÉRMICAS CLÁSSICAS E QUÂNTICAS

Este capítulo apresenta uma análise detalhada das máquinas térmicas, explorando tanto os paradigmas clássicos quanto suas extensões quânticas. Inicialmente, revisamos os princípios fundamentais da Termodinâmica, com ênfase na Primeira e na Segunda Leis, essenciais para compreender a conservação de energia e a irreversibilidade dos processos naturais. Em seguida, discutimos os principais ciclos termodinâmicos, como os ciclos de Carnot e Stirling, destacando suas características ideais e limitações de eficiência.

Na abordagem quântica, apresentamos a adaptação desses ciclos a sistemas microscópicos, nos quais estados quânticos discretos, coerência e emaranhamento desempenham papel crucial na transferência de energia e na realização de trabalho. Abordamos ainda a implementação de dispositivos quânticos, incluindo motores de Stirling com e sem regenerador, ressaltando como o armazenamento temporário de energia e a redistribuição de populações entre níveis energéticos podem otimizar a eficiência em nanoescala.

4.1 A Primeira Lei da Termodinâmica

4.1.1 A Primeira Lei da Termodinâmica na Física Clássica

A primeira lei da termodinâmica, um dos pilares da física clássica, formaliza o princípio da conservação de energia aplicado a sistemas macroscópicos:

$$\Delta U = Q - W. \quad (4.1)$$

- Energia interna (ΔU): Representa a soma das energias cinéticas e potenciais de todas as partículas do sistema. Em gases ideais, U está diretamente relacionada à temperatura, enquanto em sistemas mais complexos, incorpora interações intermoleculares.
- Calor (Q): Transferência de energia devido à diferença de temperatura entre o sistema e o ambiente. É uma forma de energia que flui espontaneamente de regiões de alta temperatura para regiões de baixa temperatura.

- Trabalho (W): Representa a energia transferida devido a forças mecânicas, como a expansão ou compressão de um gás.

Para processos quasistáticos (lentos) e reversíveis, onde o sistema está em equilíbrio termodinâmico, a variação infinitesimal de energia interna é dada por:

$$dU = \delta Q - \delta W, \quad (4.2)$$

com $\delta Q = TdS$ e $\delta W = PdV$, onde T é a temperatura, S é a entropia, P é a pressão e V é o volume. Essas relações são cruciais para descrever processos cíclicos como o ciclo de Carnot, base para o estudo da eficiência de motores térmicos. A primeira lei é central na análise de sistemas como motores a combustão, bombas de calor e processos industriais. Sua simplicidade e generalidade fazem dela um princípio universal na física e engenharia (CALLEN, 1991).

4.1.2 A Primeira Lei da Termodinâmica em Sistemas Quânticos Fechados e Independentes do Tempo

Para sistemas quânticos fechados e independentes do tempo, a Primeira Lei, previamente mostrada na expressão (4.1) continua válida, mas sua aplicação requer uma análise cuidadosa das transformações envolvidas. Um exemplo clássico é o ciclo termodinâmico quântico proposto por Kosloff e colaboradores (KOSLOFF, 2013), que consiste em quatro etapas: duas transformações isotérmicas, nas quais o sistema interage com banhos térmicos a temperaturas T_{cold} e T_{hot} , e duas transformações adiabáticas reversíveis, durante as quais o sistema permanece isolado.

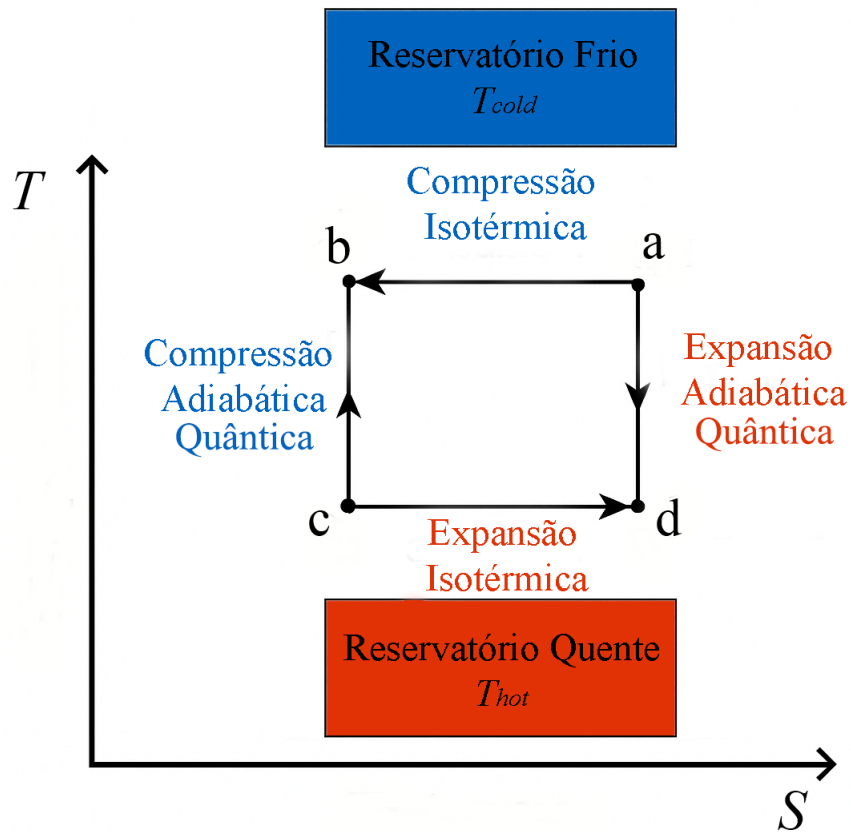
Esse processo é realizado de forma quase-estática, ou seja, suficientemente lenta para garantir equilíbrios locais em cada etapa (KOSLOFF, 2013). Durante as transformações isotérmicas, o sistema atinge o equilíbrio térmico com o reservatório correspondente, e sua matriz densidade é descrita pela distribuição de Gibbs:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}, \quad (4.3)$$

onde $Z = \text{Tr}(e^{-\beta H})$ é a função de partição, $\beta = 1/(k_B T)$, e H é o Hamiltoniano do sistema.

Durante o ciclo, ilustrado na Figura 4.1, podemos observar:

Figura 4.1 – Representação esquemática do ciclo quântico fechado a,b,c,d.



Fonte: Autor.

- Nas etapas isotérmicas $a \rightarrow b$ (compressão a T_{cold}) e $c \rightarrow d$ (expansão a T_{hot}), o sistema troca calor com os banhos térmicos. O calor trocado pode ser obtido a partir da variação de entropia:

$$Q = \int T dS. \quad (4.4)$$

- Nas etapas adiabáticas $b \rightarrow c$ e $d \rightarrow a$, o sistema está isolado dos banhos térmicos. A evolução é unitária (sem dissipação), e, portanto, não há troca de calor:

$$Q = 0. \quad (4.5)$$

Como o ciclo é quase-estático, essas transformações são adiabáticas e reversíveis, preservando a entropia, embora haja variação do Hamiltoniano e, consequentemente, trabalho realizado.

Ademais, por se tratar de um ciclo fechado, a energia interna retorna ao seu valor inicial após uma volta completa, ou seja, $\Delta U = 0$. Assim, pela Primeira Lei:

$$W = Q_{\text{total}} = Q_1 + Q_2, \quad (4.6)$$

onde Q_1 é o calor trocado com o reservatório frio durante $a \rightarrow b$, e Q_2 é o calor trocado com o reservatório quente durante $c \rightarrow d$.

Este resultado mostra que o trabalho total realizado pelo sistema corresponde à soma do calor absorvido e rejeitado durante as etapas isotérmicas. A análise termodinâmica é compatível com a formulação quântica descrita em (ALICKI, 1979; KOSLOFF, 2013), onde ciclos reversíveis em sistemas com poucos níveis energéticos podem ser tratados de forma quase-estática em contato sequencial com banhos térmicos.

4.2 Segunda Lei da Termodinâmica

A Segunda Lei da Termodinâmica também é uma estrutura fundamental da física, pois estabelece a direção natural dos processos e impõe restrições fundamentais ao rendimento das máquinas térmicas (CALLEN, 1991).

Ela pode ser enunciada de diferentes formas equivalentes, entre as quais destacam-se:

- Enunciado de Clausius: é impossível um processo cujo único resultado seja a transferência de calor de um corpo frio para um corpo quente (CLAUSIUS, 1879);
- Enunciado de Kelvin-Planck: é impossível construir uma máquina térmica que, operando em um ciclo, tenha como único efeito retirar calor de uma fonte e convertê-lo integralmente em trabalho (THOMSON, 1851).

Destarte, seus postulados estabelecem que não existe máquina térmica perfeita: sempre haverá a necessidade de uma fonte fria, o que limita a eficiência do sistema (CALLEN, 1991).

Além disso, a Segunda Lei implica na irreversibilidade de muitos processos naturais, que não podem ocorrer espontaneamente na direção oposta sem a intervenção de um agente externo. Além disso, estabelece a limitação fundamental da eficiência das máquinas térmicas: nenhum motor ou ciclo real pode converter integralmente o calor absorvido em trabalho útil, pois uma fração desse calor deve ser inevitavelmente rejeitada ao ambiente. Finalmente, a Segunda Lei introduz o conceito de entropia, associada ao grau de desordem de um sistema, cuja tendência em sistemas isolados é aumentar com o tempo, refletindo o caráter irreversível da evolução natural dos processos (CALLEN, 1991).

Essa formulação conduz naturalmente à definição de ciclos ideais reversíveis, como o Ciclo de Carnot, que estabelece a eficiência máxima teórica de uma máquina térmica operando entre duas fontes de calor (ANDRESEN; SALAMON; BERRY, 1984).

4.3 Ciclos Termodinâmicos

Nesta seção, vamos abordar os ciclos termodinâmicos utilizados em nosso modelo, como o Ciclo de Carnot e o Ciclo de Stirling, em seus modelos clássicos e quânticos.

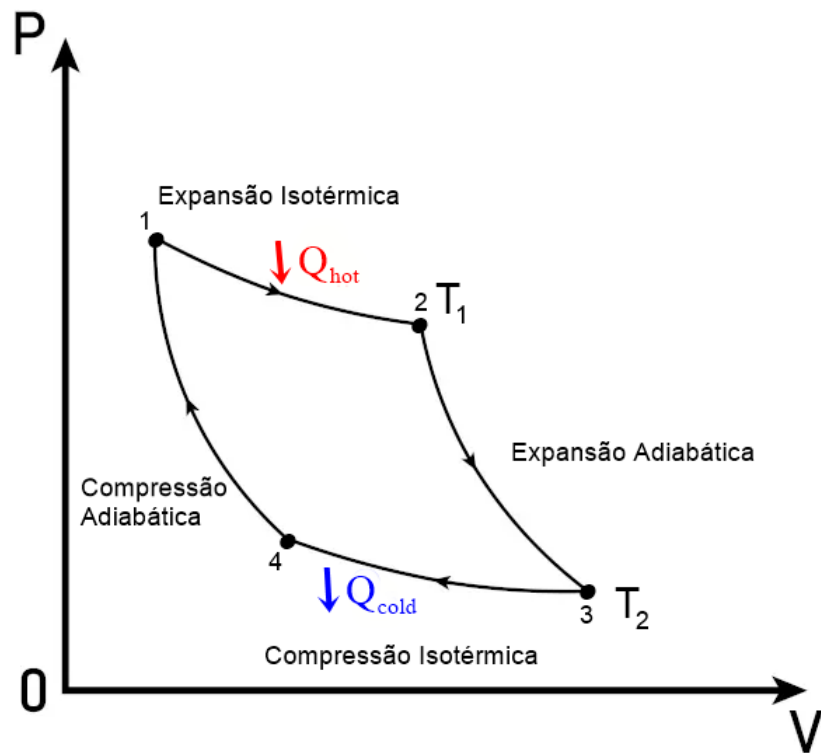
4.3.1 Ciclo de Carnot

O Ciclo de Carnot, ilustrado na Figura 4.2, é um modelo teórico idealizado que representa o funcionamento de uma máquina térmica reversível operando entre duas fontes térmicas: uma quente, à temperatura T_{hot} , e uma fria, à temperatura T_{cold} ($T_{hot} > T_{cold}$). Esse ciclo é fundamental na termodinâmica por estabelecer o limite máximo de eficiência para qualquer máquina térmica operando entre essas duas temperaturas (ANDRESEN; SALAMON; BERRY, 1984).

O ciclo consiste em quatro etapas:

1. **Expansão isotérmica reversível** à temperatura T_{hot} : o sistema absorve calor Q_{hot} da fonte quente;
2. **Expansão adiabática reversível**: o sistema continua se expandindo sem troca de calor, e sua temperatura cai de T_{hot} para T_{cold} ;

Figura 4.2 – Representação gráfica do Ciclo de Carnot.



Fonte: (ANDRESEN; SALAMON; BERRY, 1984). Modificado pelo autor.

3. **Compressão isotérmica reversível** à temperatura T_{cold} : o sistema libera calor Q_{cold} para a fonte fria;
4. **Compressão adiabática reversível**: o sistema é comprimido sem troca de calor, elevando sua temperatura de T_{cold} para T_{hot} .

A eficiência η de uma máquina de Carnot é dada por:

$$\eta = 1 - \frac{T_{cold}}{T_{hot}}, \quad (4.7)$$

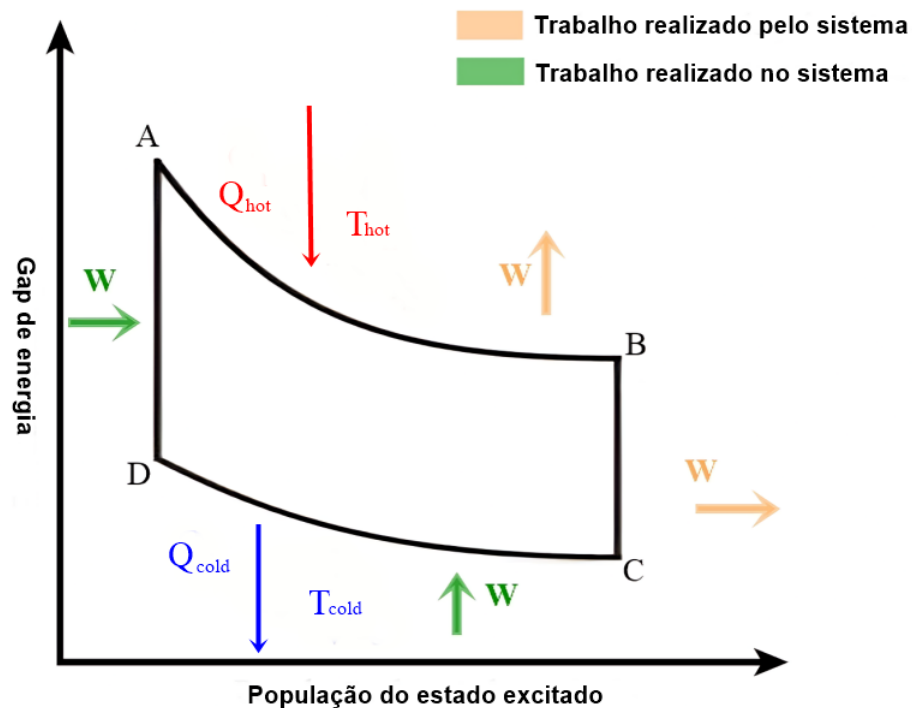
onde T_{hot} e T_{cold} são as temperaturas absolutas das fontes quente e fria, respectivamente.

Essa eficiência representa um limite superior: nenhuma máquina térmica real pode ter eficiência superior à do ciclo de Carnot. O artigo de Andresen, Salamon e Berry (1984) discute generalizações do ciclo de Carnot para sistemas irreversíveis, contribuindo para a base da termodinâmica finita (ANDRESEN; SALAMON; BERRY, 1984).

4.3.1.1 O Ciclo de Carnot Quântico

O ciclo de Carnot foi reinterpretado no contexto da termodinâmica quântica, que analisa sistemas microscópicos descritos por estados quânticos. Podemos representar como exemplo um ciclo de Carnot quântico, com quatro processos termodinâmicos em um sistema de dois níveis (CANGEMI; BHADRA; LEVY, 2024).

Figura 4.3 – Representação gráfica do ciclo de Carnot quântico em um sistema de dois níveis.



Fonte: (CANGEMI; BHADRA; LEVY, 2024). Modificado pelo autor.

Na Figura acima, o eixo vertical representa a lacuna de energia (gap), que é a diferença entre os níveis de energia do estado fundamental e do estado excitado do sistema quântico. A variação na lacuna de energia ao longo das diferentes etapas do ciclo representa a absorção ou liberação de calor pelo sistema quântico, direcionando o fluxo de energia entre a fonte quente e a fonte fria. O eixo horizontal, por outro lado, representa a população do estado excitado, que é a fração dos sistemas de dois níveis que estão no estado excitado em qualquer ponto do ciclo (CANGEMI; BHADRA; LEVY, 2024).

1. **Expansão Isotérmica:** A primeira etapa é ilustrada por uma seta vermelha apontando para baixo, indicando o calor absorvido Q_{hot} da fonte quente, associada à temperatura T_{hot} .
2. **Compressão Adiabática:** Na segunda etapa, uma seta laranja aponta para a direita, indicando o trabalho W realizado pelo sistema.
3. **Compressão Isotérmica:** O terceiro processo é mostrado por uma seta azul apontando para baixo, indicando o calor rejeitado Q_{cold} para a fonte fria a uma temperatura T_{cold} .
4. **Expansão Adiabática:** A última etapa, de expansão adiabática, é representada por uma seta verde à esquerda, indicando o trabalho W realizado sobre o sistema.

A eficiência do ciclo de Carnot quântico permanece igual ao limite clássico da expressão (4.7), devido ao fato de que, no início dos cursos ($A \rightarrow B$) e ($C \rightarrow D$), a temperatura do sistema e a dos banhos são iguais. Essa condição assegura que o sistema quântico se encontre em equilíbrio térmico com os reservatórios no momento em que a troca de calor é iniciada, caracterizando um processo reversível. Nessa situação, não há diferença de temperatura entre o sistema e o banho, o que implica que o calor é transferido de forma quase estática, sem produção líquida de entropia. Consequentemente, não ocorrem perdas associadas à dissipação ou à irreversibilidade, e o rendimento do ciclo atinge o limite máximo estabelecido por Carnot. Assim, mesmo em um contexto quântico, a eficiência depende apenas das temperaturas dos reservatórios térmicos, mantendo-se igual ao limite clássico dado pela expressão (4.7), indicando que a natureza quântica do sistema de trabalho não altera o valor máximo teórico de eficiência, mas apenas as características microscópicas do processo de conversão de energia (CANGEMI; BHADRA; LEVY, 2024).

A eficiência pode ser calculada via:

$$\eta_C = \frac{|W|}{Q_{hot}} = \frac{Q_{hot} + Q_{cold}}{Q_{hot}} = 1 - \frac{T_{cold}}{T_{hot}}, \quad (4.8)$$

o trabalho extraído e o calor transferido dependem das propriedades quânticas, como emaranhamento e coerência.

Estudos recentes mostram que a utilização de estados quânticos correlacionados pode aumentar a potência de motores quânticos sem violar as leis da termodinâmica. Em um nível conceitual, esses estados oferecem novos “recursos termodinâmicos” que não têm análogo clássico (HUANG et al., 2014). Por exemplo, a presença de correlações mediadas pelo ambiente em sistemas compostos por múltiplos osciladores pode gerar uma vantagem coletiva, permitindo que o motor opere com maior potência do que a soma das potências obtidas se os sistemas funcionassem de forma independente (BHATTACHARYA et al., 2023). De modo semelhante, a introdução de transferências coerentes de calor nos motores quânticos contínuos reduz a aleatoriedade das transições induzidas pelos banhos térmicos, o que resulta em ganhos expressivos de potência e em maior regularidade de operação (GHOSH et al., 2024).

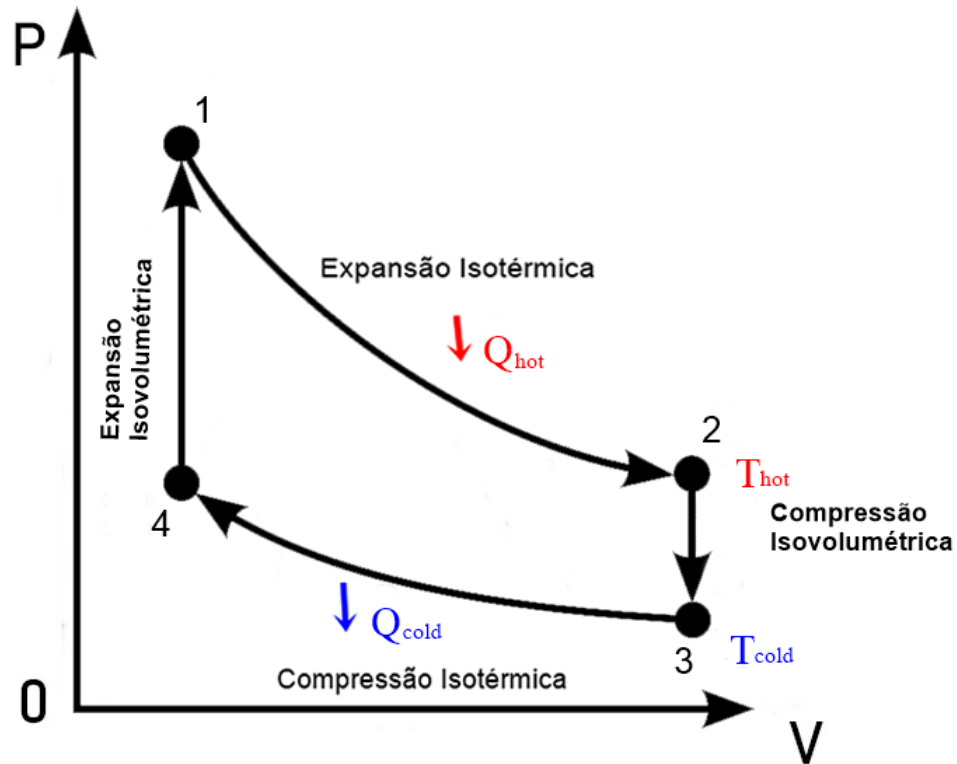
4.3.2 Ciclo de Stirling

A termodinâmica clássica e quântica exploram diferentes paradigmas sobre a conversão de energia em motores térmicos. Enquanto o ciclo de Carnot estabelece o limite teórico de eficiência em sistemas macroscópicos, o ciclo de Stirling quântico adapta processos termodinâmicos a sistemas regidos pelas leis da mecânica quântica, oferecendo informações quânticas sobre energia em nanoescala.

4.3.2.1 O Ciclo de Stirling Clássico

O ciclo de Stirling em seu modelo clássico é um ciclo termodinâmico reversível que opera com dois processos isotérmicos (aquecimento e resfriamento) intercalados por dois processos isocóricos (transferência de calor a volume constante). Esse ciclo é a base de motores Stirling, que convertem calor em trabalho mecânico de maneira eficiente e silenciosa. Consiste em quatro processos reversíveis (HUANG et al., 2014), como na Figura abaixo:

Figura 4.4 – Representação gráfica do Ciclo de Stirling.



Fonte: (HUANG et al., 2014). Modificado pelo autor.

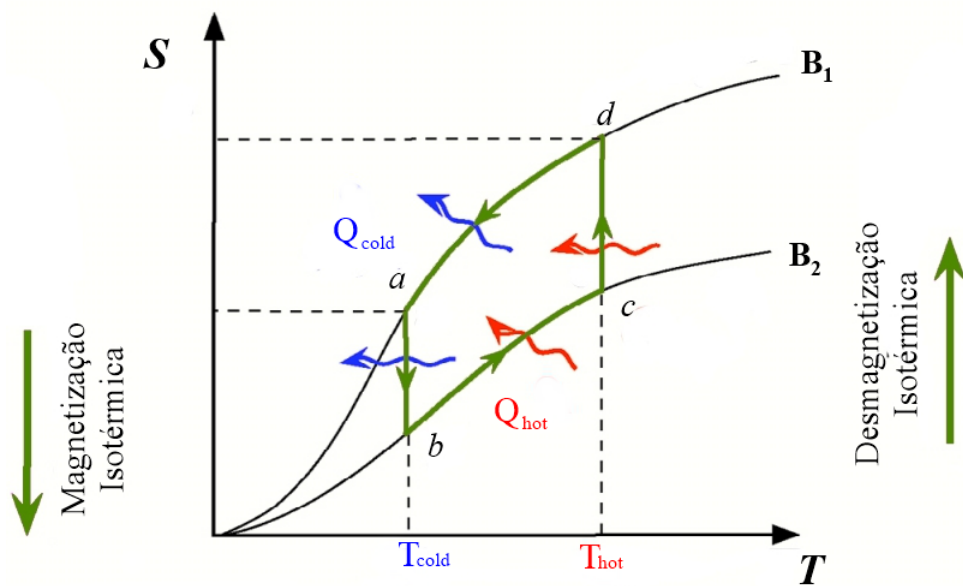
1. **Expansão isotérmica:** O sistema absorve calor Q_{hot} da fonte quente, realizando trabalho.
2. **Resfriamento isocórico:** O volume é mantido constante; o sistema transfere calor ao regenerador, reduzindo sua temperatura.
3. **Compressão isotérmica:** O sistema rejeita calor Q_{cold} para a fonte fria.
4. **Aquecimento isocórico:** O volume é mantido constante; o sistema recebe calor do regenerador, retornando ao estado inicial.

A eficiência máxima do ciclo é η_C , expressa acima em 4.7. Embora essa eficiência nunca possa ser superada, o ciclo de Carnot é um modelo ideal que não considera irreversibilidades presentes em motores reais (HUANG et al., 2014).

4.3.2.2 O Ciclo de Stirling Quântico

No contexto quântico, o ciclo de Stirling, representado na Figura 4.5, adapta processos de compressão e expansão isotérmica e isoentrópica, comuns na termodinâmica clássica, a sistemas descritos por estados quânticos. Os motores quânticos de Stirling geralmente utilizam sistemas de dois níveis ou osciladores harmônicos como meio de trabalho, com as transições entre níveis energéticos desempenhando papel crucial no fluxo de calor e no trabalho realizado (LI et al., 2025).

Figura 4.5 – Representação do Ciclo de Stirling Quântico baseado em um sistema magnético. As curvas delimitadas por B_1 e B_2 indicam diferentes estados do sistema para campos magnéticos distintos. As setas verdes indicam o sentido do ciclo termodinâmico.



Fonte: (ROJAS; ROJAS, 2025). Modificado pelo autor.

No artigo "Quantum Machines Using Cu_3 -Like Compounds Modeled by Heisenberg Antiferromagnetic in a Triangular Ring", (ROJAS; ROJAS, 2025) exploram a possibilidade de implementar ciclos quânticos usando compostos moleculares de cobre (Cu_3), que exibem acoplamento antiferromagnético descrito pelo modelo de Heisenberg em uma rede triangular. Esses sistemas quânticos possuem níveis de energia discretos bem definidos, que podem ser manipulados termicamente e magneticamente para realizar ciclos como o de Stirling.

O ciclo proposto nesse contexto envolve:

1. **Aquecimento isotérmico:** o sistema é mantido em contato com um banho térmico a alta temperatura T_{hot} , enquanto parâmetros externos (como campo magnético ou constante de acoplamento J) são modificados lentamente;
2. **Compressão isocórica quântica:** o sistema é isolado e sofre evolução unitária (sem troca de calor), com reconfiguração dos níveis energéticos internos;
3. **Resfriamento isotérmico:** contato com banho a temperatura T_{cold} ($T_{cold} < T_{hot}$), ocorrendo liberação de calor;
4. **Expansão isocórica quântica:** nova transformação unitária, restaurando as condições iniciais.

Para analisar este ciclo térmico reversível de spin único envolvendo duas temperaturas T_{hot} e T_{cold} , e campos magnéticos diferentes (B_1 e B_2), os fluxos de calor (Q_1 , Q_2) e o trabalho total (W) podem ser determinados a partir das variações na entropia e na energia interna:

$$Q_1 = \int_a^b T dS = T_{hot}[S(b) - S(a)], \quad (4.9)$$

$$Q_2 = \int_c^d T dS = T_{cold}[S(d) - S(c)], \quad (4.10)$$

aqui, S é a entropia da substância de trabalho. Para um sistema de dois níveis em equilíbrio térmico com temperatura T , a entropia é dada por:

$$S = -k_B \sum_n p_n \ln(p_n). \quad (4.11)$$

Nos dois processos isocóricos quânticos, nenhum trabalho é realizado. A transferência de calor é igual à variação da energia interna U . Para o nosso sistema, a energia interna é dada por:

$$U = \langle H \rangle = \sum_n p_n E_n,$$

H é a função Hamiltoniana do sistema. A contribuição associada à energia interna nos estados de fronteira é dada por:

$$Q_{bc} = U(c) - U(b), \quad (4.12)$$

$$Q_{da} = U(a) - U(d). \quad (4.13)$$

Onde $Q > 0$ e $Q < 0$ correspondem à absorção e liberação de calor, respectivamente. Com base nessas trocas de calor, podemos obter a saída de trabalho total W por ciclo de acordo com a primeira lei da termodinâmica da seguinte forma:

$$W = \Delta Q = Q_1 + Q_2 + Q_{bc} + Q_{da}. \quad (4.14)$$

A eficiência do ciclo de Stirling quântico é limitada por:

$$\eta = \frac{W}{Q_{hot}}, \quad (4.15)$$

nesta circunstância Q_{hot} pode ser obtido:

$$Q_{hot} = Q_1 + \delta \Delta Q, \quad (4.16)$$

em que $\delta = 0$ para $\Delta Q < 0$ e $\delta = 1$ para $\Delta Q > 0$.

É importante destacar que, assim como em qualquer máquina térmica clássica ou quântica, a eficiência do ciclo de Stirling não pode exceder o limite estabelecido pelo ciclo de Carnot, advindo da expressão (4.7), que depende apenas das temperaturas das fontes térmicas (HUANG et al., 2014).

Esse resultado decorre diretamente da Segunda Lei da Termodinâmica, garantindo que nenhum motor operando entre duas fontes térmicas possa superar tal limite (CALLEN, 1991).

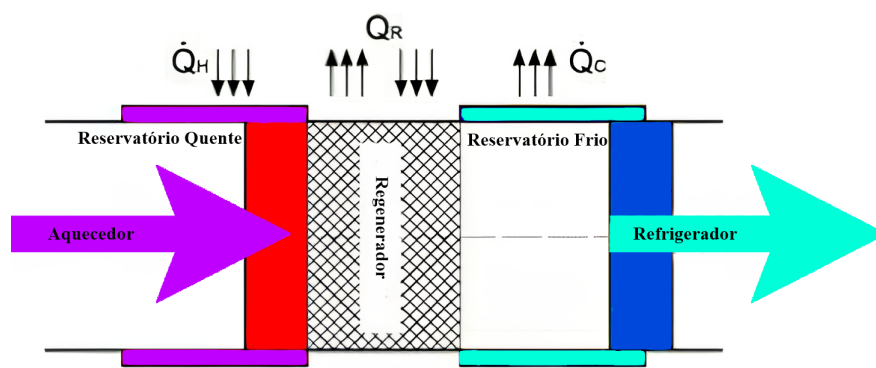
Devido às propriedades quânticas, como coerência e emaranhamento, o ciclo de Stirling quântico pode alcançar maior densidade de potência do que seu análogo clássico, destacando-se em aplicações em nanoescala (HUANG et al., 2014).

4.4 Máquina de Stirling Quântica: Implementação do Regenerador

No trabalho de Huang et al. (HUANG et al., 2014), os autores investigam o desempenho de uma máquina térmica de Stirling e de um refrigerador de Stirling baseados em sistemas de spins acoplados e isolados, analisando os efeitos da presença ou ausência de um regenerador no ciclo.

O regenerador, ilustrado na Figura 4.6, é um componente fundamental nas máquinas de Stirling clássicas, atuando como um meio de armazenamento temporário de calor. Durante o ciclo, ele armazena calor durante a fase de resfriamento e o devolve durante a fase de aquecimento, reduzindo perdas térmicas e aumentando a eficiência global do sistema.

Figura 4.6 – Representação de um regenerador atuando no Ciclo de Stirling.



Fonte: Autor.

Na versão quântica do ciclo, o papel do regenerador é representado por um processo idealizado em que o calor é armazenado internamente e reutilizado entre as etapas isotérmicas. No modelo proposto por Huang et al. (HUANG et al., 2014), a consideração da regeneração afeta diretamente as trocas de calor e, por consequência, o desempenho energético da máquina. Nesse contexto, a energia é armazenada temporariamente no próprio sistema quântico, por meio da redistribuição de populações entre os níveis de energia durante as etapas de compressão e expansão. Esse armazenamento interno atua como um reservatório intermediário, permitindo que parte do calor liberado em uma etapa seja reaproveitado na etapa subsequente, reduzindo a dissipação e aumentando a eficiência do ciclo.

4.4.1 Ciclo Sem Regenerador

Na ausência de um regenerador, toda a energia térmica é trocada diretamente com os reservatórios térmicos externos. As características principais deste cenário são:

- Maior dissipação de energia para os banhos térmicos;
- Eficiência térmica inferior, devido à ausência de recuperação de calor;
- Redução do trabalho líquido extraído por ciclo.

4.4.2 Ciclo Com Regenerador

Ao incluir um regenerador ideal no sistema, parte do calor trocado durante as transformações isotérmicas é retido e reutilizado no próprio ciclo. As vantagens incluem:

- Redução da quantidade de calor líquido trocado com os banhos térmicos;
- Aumento da eficiência térmica da máquina;
- Potencial de se aproximar da eficiência de Carnot, especialmente em ciclos quase reversíveis.

5 O MODELO

Neste tópico, iremos investigar o ciclo Stirling aplicado a um único elétron confinado em um sistema de ponto quântico duplo sob a influência de um campo magnético transversal, sistema central da nossa análise. Este modelo combina conceitos de termodinâmica quântica e mecânica estatística para descrever as propriedades térmicas e quânticas do sistema (HUANG et al., 2014). O ponto quântico duplo é representado por dois potenciais confinantes acoplados, com o campo magnético transversal induzindo efeitos relevantes na dinâmica e no tunelamento do elétron entre os dois pontos (BENITO et al., 2017; FUJISAWA et al., 1998; HAYASHI et al., 2003).

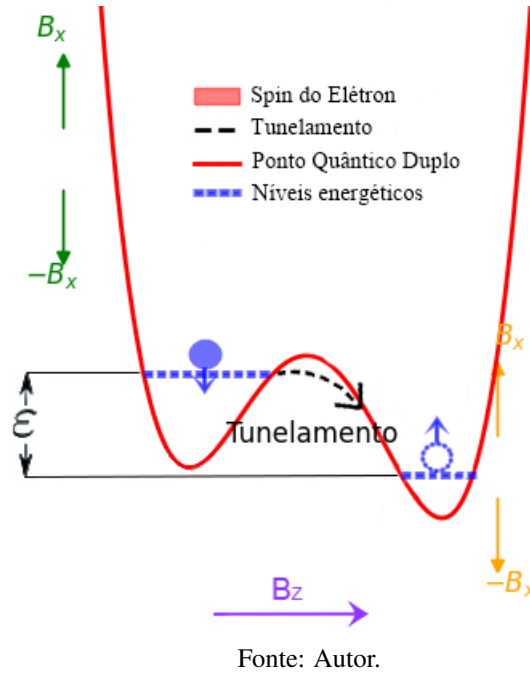
A escolha do ciclo de Stirling se deve à sua versatilidade e adaptação ao regime quântico. Diferente dos ciclos de Otto e Carnot, ele utiliza transformações isocóricas que permitem o controle de parâmetros externos, como campos magnéticos ou acoplamentos de tunelamento, sem variações abruptas. Isso o torna adequado para sistemas nanoscópicos, onde os estados quânticos podem ser manipulados experimentalmente. Embora sua eficiência seja limitada pelo ciclo de Carnot, pode ser otimizada em dispositivos quânticos, possibilitando o estudo dos efeitos de coerência e emaranhamento no desempenho de máquinas térmicas (ROJAS; ROJAS, 2025; HUANG et al., 2014).

5.1 Spin do Elétron em um Ponto Quântico Duplo com Campo Magnético Transversal

O sistema analisado consiste em um dispositivo de silício com um único elétron confinado em um ponto quântico duplo, que pode ser modelado como dois potenciais confinantes acoplados por tunelamento quântico, ilustrado na Figura 5.1. A interação entre os dois pontos quânticos é mediada por um potencial que permite a transição do elétron entre os estados localizados em cada ponto, criando uma base para estudar propriedades quânticas, como coerência e emaranhamento (LEITÃO; ROJAS; ROJAS, 2025; FERREIRA; ROJAS; ROJAS, 2023; DAHBI et al., 2023; FILGUEIRAS; ROJAS; ROJAS, 2020; OLIVEIRA; ROJAS; FILGUEIRAS, 2021).

Este dispositivo possui duas configurações de carga, com o elétron localizado no ponto esquerdo (L) ou direito (R), correspondendo aos estados de posição rotulados como $|L\rangle$ e $|R\rangle$, respectivamente (LEITÃO; ROJAS; ROJAS, 2025).

Figura 5.1 – Spin do elétron confinado em dois pontos quânticos acoplados com um campo magnético homogêneo em B_z e um gradiente perpendicular de campo magnético em B_x . Considera-se um desnível energético no sistema, propiciando eventuais tunelamentos.



O Hamiltoniano do ponto quântico duplo na presença de um campo magnético homogêneo B_z e um gradiente de campo magnético B_x perpendicular a este é dado por:

$$H = \frac{\varepsilon}{2} \tau_z + t \tau_x + \frac{B_z}{2} \sigma_z + \frac{B_x}{2} \tau_z \sigma_x, \quad (5.1)$$

onde:

- $\frac{\varepsilon}{2} \tau_z$: diferença de energia (bias) entre os estados orbitais;
- $t \tau_x$: termo de tunelamento que acopla os estados de carga;
- $\frac{B_z}{2} \sigma_z$: termo de Zeeman associado ao campo magnético longitudinal;
- $\frac{B_x}{2} \tau_z \sigma_x$: acoplamento spin-órbita, em que o campo transversal depende do estado orbital.

O tunelamento entre os dois pontos quânticos cria uma superposição de estados localizados, levando à formação de estados híbridos de ligação e anti-ligação. O campo magnético transversal, por

sua vez, modifica as energias desses estados e altera a dinâmica quântica do elétron (LEITÃO; ROJAS; ROJAS, 2025; FERREIRA; ROJAS; ROJAS, 2023; FILGUEIRAS; ROJAS; ROJAS, 2020; DAHBI et al., 2023; OLIVEIRA; ROJAS; FILGUEIRAS, 2021).

Os estados de ligação e anti-ligação surgem da combinação linear dos estados localizados em cada ponto quântico. O estado de ligação corresponde a uma superposição simétrica das funções de onda, na qual a densidade de probabilidade do elétron é maior entre os dois pontos, resultando em menor energia total do sistema. Já o estado de anti-ligação corresponde a uma superposição antissimétrica, caracterizada por uma densidade de probabilidade reduzida na região intermediária e, consequentemente, uma energia mais alta. Essa diferença energética entre os dois estados depende diretamente da intensidade do acoplamento por tunelamento (DOTY et al., 2009).

Além disso, ao ajustar parâmetros externos, como o campo magnético ou a diferença de energia entre os pontos, é possível observar o anticruzamento, que ocorre quando dois níveis de energia, que tenderiam a se cruzar, interagem fortemente devido ao acoplamento quântico, resultando em uma separação mínima de energia entre eles. O anticruzamento é uma assinatura direta da coerência e do acoplamento entre estados quânticos, sendo amplamente utilizado na caracterização espectroscópica de sistemas de pontos quânticos acoplados (DOTY et al., 2009).

Agora, abrindo os termos matriciais da expressão (5.1), o subespaço orbital (τ) é dado por:

$$\tau_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \tau_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (5.2)$$

Já o subespaço de spin (σ):

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (5.3)$$

O espaço total é dado pelo produto tensorial *orbital* $\otimes$ *spin*. Assim:

- $\tau_i \otimes I$: operador que atua apenas no subespaço orbital;
- $I \otimes \sigma_i$: operador que atua apenas no subespaço de spin;

- $\tau_i \otimes \sigma_j$: operador que acopla simultaneamente os dois subespaços.

Destarte, multiplicamos os termos matriciais e, a fim de facilitar nosso processo, dividimos as parcelas da expressão (5.1) em quatro blocos:

1) $\frac{\varepsilon}{2} \tau_z \otimes \mathbf{I}_\sigma$:

$$\tau_z \otimes \mathbf{I}_\sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Logo,

$$\frac{\varepsilon}{2}(\tau_z \otimes \mathbf{I}_\sigma) = \begin{bmatrix} \frac{\varepsilon}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\varepsilon}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\varepsilon}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\varepsilon}{2} \end{bmatrix}.$$

2) $t \tau_x \otimes \mathbf{I}_\sigma$:

$$\tau_x \otimes \mathbf{I}_\sigma = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

dessa forma,

$$t(\tau_x \otimes \mathbf{I}_\sigma) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t \\ t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

3) $\frac{B_z}{2} \mathbf{I}_\tau \otimes \sigma_z$:

$$\mathbf{I}_\tau \otimes \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

assim,

$$\frac{B_z}{2} (\mathbf{I}_\tau \otimes \sigma_z) = \begin{bmatrix} \frac{B_z}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{B_z}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{B_z}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{B_z}{2} \end{bmatrix}.$$

4) $\frac{B_x}{2} \tau_z \otimes \sigma_x$:

$$\tau_z \otimes \sigma_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix},$$

portanto,

$$\frac{B_x}{2} (\tau_z \otimes \sigma_x) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{B_x}{2} & 0 & 0 \\ \frac{B_x}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{B_x}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{B_x}{2} & 0 \end{bmatrix}.$$

Somando os quatro blocos, obtemos a matriz da Hamiltoniana deste sistema, que será crucial para nossa análise. A partir dela, obtemos as energias e os autovetores normalizados (ou estados próprios). Podemos representá-la da seguinte forma:

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\varepsilon}{2} + \frac{B_z}{2} & \frac{B_x}{2} & t & 0 \\ \frac{B_x}{2} & \frac{\varepsilon}{2} - \frac{B_z}{2} & 0 & t \\ t & 0 & -\frac{\varepsilon}{2} + \frac{B_z}{2} & -\frac{B_x}{2} \\ 0 & t & -\frac{B_x}{2} & -\frac{\varepsilon}{2} - \frac{B_z}{2} \end{bmatrix}.$$

A matriz está escrita na base $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$. Ou seja, trata-se da base formada pelo produto tensorial entre os estados de posição (poço esquerdo L ou direito R) e os estados de spin ($|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle$ e $|1\rangle \equiv |\downarrow\rangle$).

Diagonalizando a matriz, obtemos os autovalores de H e, conseqüentemente, as energias, dadas por:

$$E_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{\Omega + 2\sqrt{\Gamma}}}{2}, \quad (5.4)$$

$$E_{3,4} = \pm \frac{\sqrt{\Omega - 2\sqrt{\Gamma}}}{2}, \quad (5.5)$$

onde: $\Omega = B_x^2 + B_z^2 + \varepsilon^2 + 4t^2$, $\Gamma = B_x^2\varepsilon^2 + B_z^2\varepsilon^2 + 4B_z^2t^2$.

Nesta perspectiva, substituindo os autovalores na matriz original e resolvendo o sistema linear, obtemos os autovetores (ou estados próprios) correspondentes:

$$|\varphi_{1,2}\rangle = G_{\pm}(a_{\pm}|L0\rangle + b_{\pm}|L1\rangle + |R0\rangle + c_{\pm}|R1\rangle) \quad (5.6)$$

$$|\varphi_{3,4}\rangle = F_{\pm}(\tilde{a}_{\pm}|L0\rangle + \tilde{b}_{\pm}|L1\rangle + |R0\rangle + \tilde{c}_{\pm}|R1\rangle) \quad (5.7)$$

Onde:

- $G_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{a_{\pm}^2 + b_{\pm}^2 + c_{\pm}^2 + 1}};$
- $F_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{\tilde{a}_{\pm}^2 + \tilde{b}_{\pm}^2 + \tilde{c}_{\pm}^2 + 1}};$
- $a_{\pm} = \frac{(\varepsilon \pm E_1)^2 - E_3^2}{2t(B_z + \varepsilon)};$

- $\tilde{a}_{\pm} = \frac{(\epsilon \pm E_3)^2 - E_1^2}{2t(B_z + \epsilon)}$
- $b_{\pm} = \frac{E_1 [\mp B_z \epsilon + (\epsilon - B_z) E_1 \pm (E_1^2 - E_3^2)]}{B_x t (B_z + \epsilon)} + \frac{\alpha^2}{4B_x t};$
- $\tilde{b}_{\pm} = \frac{E_3 [\mp B_z \epsilon + (\epsilon - B_z) E_3 \mp (E_1^2 - E_3^2)]}{B_x t (B_z + \epsilon)} + \frac{\alpha^2}{4B_x t};$
- $c_{\pm} = \frac{(B_z \mp E_1)^2 - E_3^2}{(B_z + \epsilon) B_x};$
- $\tilde{c}_{\pm} = \frac{(B_z \mp E_3)^2 - E_1^2}{(B_z + \epsilon) B_x};$
- $\alpha^2 = B_z^2 + B_x^2 - \epsilon^2 - 4t^2.$

5.1.1 Operador Densidade Térmico

Agora, para calcularmos a entropia deste sistema é fundamental encontrar de antemão o operador densidade do mesmo (LEITÃO; ROJAS; ROJAS, 2025). Para este um sistema físico com quatro estados $|\varphi\rangle_n$, cada qual associado a uma energia E_n . A matriz densidade térmica escrita na base $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ pode ser escrita como:

$$\hat{\rho} = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{13} & \rho_{23} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{14} & \rho_{24} & \rho_{34} & \rho_{44} \end{bmatrix},$$

aqui, $\rho_{ij} = \langle i | \hat{\rho} | j \rangle$, com $i, j \in \{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$, onde cada termo da matriz está representado abaixo:

$$\begin{aligned} \rho_{11} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} a_+^2 + F_-^2 e^{-\beta E_2} a_-^2 + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{a}_+^2 + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{a}_-^2] \\ \rho_{12} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} a_+ b_+ + F_-^2 e^{-\beta E_2} a_- b_- + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{a}_+ \tilde{b}_+ + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{a}_- \tilde{b}_-] \\ \rho_{13} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} a_+ + F_-^2 e^{-\beta E_2} a_- + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{a}_+ + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{a}_-] \\ \rho_{14} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} a_+ c_+ + F_-^2 e^{-\beta E_2} a_- c_- + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{a}_+ \tilde{c}_+ + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{a}_- \tilde{c}_-] \\ \rho_{22} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} b_+^2 + F_-^2 e^{-\beta E_2} b_-^2 + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{b}_+^2 + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{b}_-^2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho_{23} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} b_+ + F_-^2 e^{-\beta E_2} b_- + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{b}_+ + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{b}_-] \\
\rho_{24} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} b_+ c_+ + F_-^2 e^{-\beta E_2} b_- c_- + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{b}_+ \tilde{c}_+ + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{b}_- \tilde{c}_-] \\
\rho_{33} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} + F_-^2 e^{-\beta E_2} + G_+^2 e^{-\beta E_3} + G_-^2 e^{-\beta E_4}] \\
\rho_{34} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} c_+ + F_-^2 e^{-\beta E_2} c_- + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{c}_+ + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{c}_-] \\
\rho_{44} &= \frac{1}{Z} [F_+^2 e^{-\beta E_1} c_+^2 + F_-^2 e^{-\beta E_2} c_-^2 + G_+^2 e^{-\beta E_3} \tilde{c}_+^2 + G_-^2 e^{-\beta E_4} \tilde{c}_-^2]
\end{aligned}$$

5.1.2 Entropia Von Neumann do Sistema

Com base nos termos calculados na matriz densidade, pode-se obter a entropia para este sistema, fundamental para a sua descrição estatística de sistemas físicos e está diretamente relacionada à distribuição probabilística de estados e ao grau de desordem do mesmo. Neste sistema, utilizaremos a entropia de Von Neumann, resgatada da expressão (2.11).

Para sistemas com níveis de energia discretos E_i e temperatura definida por $\beta = 1/(k_B T)$, o operador densidade no estado de equilíbrio térmico é dado por:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}. \quad (5.8)$$

A função de partição para este sistema pode ser representada da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{n=1}^4 e^{-\beta E_n} \\
&= e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_4},
\end{aligned} \quad (5.9)$$

substituindo as expressões (5.4) e (5.5) em Z e utilizando a identidade $\cosh(\phi) = \frac{e^\phi + e^{-\phi}}{2}$:

$$Z = 2 \cosh(\beta E_1) + 2 \cosh(\beta E_3) = 2 [\cosh(\beta E_1) + \cosh(\beta E_3)]. \quad (5.10)$$

Como o sistema possui quatro níveis de energia E_n , para as curvas em equilíbrio térmico com temperatura T , a entropia pode ser explicitamente calculada como:

$$\begin{aligned}
S &= -k_B \sum_{n=1}^4 \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \ln \left(\frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \right) \\
&= -k_B \sum_{n=1}^4 \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} (-\beta E_n - \ln Z) \\
&= k_B \beta \sum_{n=1}^4 \frac{E_n e^{-\beta E_n}}{Z} + k_B \ln Z \sum_{n=1}^4 \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \\
&= k_B (\beta \langle E \rangle + \ln Z),
\end{aligned} \tag{5.11}$$

onde:

$$U = \langle E \rangle = \sum_{n=1}^4 \rho_n E_n = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^4 E_n e^{-\beta E_n}. \tag{5.12}$$

Substituindo na expressão da energia média e utilizando a identidade $\sinh(\phi) = \frac{e^\phi - e^{-\phi}}{2}$, obtemos:

$$\begin{aligned}
U &= E_1 e^{-\beta E_1} + (-E_1) e^{\beta E_1} + E_3 e^{-\beta E_3} + (-E_3) e^{\beta E_3} \\
&= \frac{E_1 (e^{-\beta E_1} - e^{\beta E_1}) + E_3 (e^{-\beta E_3} - e^{\beta E_3})}{Z} \\
&= \frac{-2 [E_1 \sinh(\beta E_1) + E_3 \sinh(\beta E_3)]}{Z},
\end{aligned} \tag{5.13}$$

cancelando o fator comum com Z (os fatores 2) resulta:

$$U = - \frac{E_1 \sinh(\beta E_1) + E_3 \sinh(\beta E_3)}{\cosh(\beta E_1) + \cosh(\beta E_3)}. \tag{5.14}$$

Portanto, a Entropia Von Neumann do Sistema se dá por:

$$S = k_B \left[-\beta \frac{E_1 \sinh(\beta E_1) + E_3 \sinh(\beta E_3)}{\cosh(\beta E_1) + \cosh(\beta E_3)} + \ln \left(2 [\cosh(\beta E_1) + \cosh(\beta E_3)] \right) \right]. \tag{5.15}$$

5.1.3 Fluxos de Calor do Ciclo Térmico

A expressão para a entropia obtida acima fornece uma base para encontrar os fluxos de calor Q_1 e Q_2 e explorar a influência de parâmetros externos, como o campo magnético B_z e a temperatura T . Partindo das expressões (4.9) e (4.10), obtemos:

$$\begin{aligned}
 Q_1 = T_{hot} k_B \left\{ -\beta_{hot} \frac{E_1 \sinh(\beta_{hot} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{hot} E_3)}{\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)} \right. \\
 + \ln(2[\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)]) \\
 + \beta_{cold} \frac{E_1 \sinh(\beta_{cold} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{cold} E_3)}{\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)} \\
 \left. - \ln(2[\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)]) \right\}
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

$$\begin{aligned}
 Q_2 = T_{cold} k_B \left\{ -\beta_{cold} \frac{E_1 \sinh(\beta_{cold} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{cold} E_3)}{\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)} \right. \\
 + \ln(2[\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)]) \\
 + \beta_{hot} \frac{E_1 \sinh(\beta_{hot} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{hot} E_3)}{\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)} \\
 \left. - \ln(2[\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)]) \right\}
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

Agora, para a análise dos fluxos de calor Q_{bc} e Q_{da} , utilizamos a função de U e a substituímos nas expressões (4.12) e (4.13), logo encontramos:

$$\begin{aligned}
 Q_{bc} &= U(c) - U(b) \\
 &= -\frac{E_1 \sinh(\beta_{hot} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{hot} E_3)}{\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)} + \frac{E_1 \sinh(\beta_{cold} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{cold} E_3)}{\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)},
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

$$\begin{aligned}
 Q_{da} &= U(a) - U(d) \\
 &= -\frac{E_1 \sinh(\beta_{cold} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{cold} E_3)}{\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)} + \frac{E_1 \sinh(\beta_{hot} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{hot} E_3)}{\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)}.
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

5.1.4 Trabalho do Sistema

Agora, com os quatro calores do ciclo calculados, poderemos, enfim, calcular o trabalho total do sistema e, por meio deste, obter a eficiência do mesmo, partindo da expressão (4.14):

$$W = Q_1 + Q_2 + Q_{bc} + Q_{da}, \quad (5.20)$$

como $Q_{bc} = -Q_{da}$ tais parcelas se anulam, logo, o trabalho líquido realizado no ciclo é dado por:

$$\begin{aligned} W = k_B \Bigg\{ & T_{hot} \left[\frac{E_1 \sinh(\beta_{hot} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{hot} E_3)}{\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)} \right. \\ & \left. + \ln \left(\frac{\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)}{\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)} \right) \right] \\ & - T_{cold} \left[\frac{E_1 \sinh(\beta_{cold} E_1) + E_3 \sinh(\beta_{cold} E_3)}{\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)} \right. \\ & \left. \left. + \ln \left(\frac{\cosh(\beta_{cold} E_1) + \cosh(\beta_{cold} E_3)}{\cosh(\beta_{hot} E_1) + \cosh(\beta_{hot} E_3)} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

5.2 Eficiência da Máquina Térmica Quântica e o Limite de Carnot

A eficiência de uma máquina térmica quântica quantifica a fração do calor absorvido da fonte quente que é convertida em trabalho útil. Para o ciclo de Stirling quântico analisado, essa eficiência é definida por:

$$\eta = \frac{W'}{Q_{hot}}, \quad (5.22)$$

em que W' representa o trabalho líquido realizado pelo sistema e Q_{hot} é o calor absorvido da fonte quente (HUANG et al., 2014). Neste modelo, Q_{hot} inclui eventuais contribuições da regeneração térmica, sendo dado por:

$$Q_{hot} = Q_1 + \varepsilon_R \Delta Q, \quad (5.23)$$

onde a variação de calor no regenerador é:

$$\Delta Q = Q_{bc} + Q_{da}, \quad (5.24)$$

e o parâmetro ε_R corresponde à *efetividade do regenerador*, definida como:

$$\varepsilon_R = \frac{Q_{\text{reg, efetivo}}}{\Delta Q}. \quad (5.25)$$

A efetividade do regenerador mede a fração do calor efetivamente reaproveitado durante as etapas isocóricas do ciclo (NIELSEN; YORK; MACDONALD, 2019). Por definição, é limitada por:

$$0 \leq \varepsilon_R \leq 1,$$

$\varepsilon_R = 0$ corresponde a um regenerador ineficaz, em que não há reaproveitamento de calor;

$\varepsilon_R = 1$ representa o regenerador ideal, que armazena e devolve integralmente a energia térmica ao sistema.

Dessa forma, quanto mais próximo de $\varepsilon_R = 1$, maior o aproveitamento do calor interno, reduzindo a necessidade de absorção líquida de calor da fonte quente (NIELSEN; YORK; MACDONALD, 2019).

Diferentemente das máquinas térmicas clássicas, os ciclos térmicos quânticos podem apresentar comportamentos que extrapolam as limitações da termodinâmica convencional. Efeitos exclusivamente quânticos, como o emaranhamento, o acoplamento entre spins e a coerência quântica, podem ser explorados para manipular as populações dos estados energéticos de forma otimizada (HUANG et al., 2014).

Sob certas condições, esses efeitos permitem alcançar eficiências superiores às obtidas por sistemas clássicos operando nas mesmas temperaturas, embora sem violar o limite superior imposto pela eficiência de Carnot:

$$\eta_{\text{Carnot}} = 1 - \frac{T_{\text{cold}}}{T_{\text{hot}}}. \quad (5.26)$$

A proximidade da eficiência quântica com o limite de Carnot depende fortemente da engenharia do sistema, incluindo o controle coerente da dinâmica e dos acoplamentos internos (HUANG et al., 2014).

No modo motor térmico, a eficiência do motor quântico é representada por η , que satisfaz $\eta < 1$. Para os modos operacionais, o coeficiente de desempenho (COP) é analisado em detalhe (ZHANG et al., 2007). Como os valores de COP são tipicamente maiores que um, propomos uma expressão alternativa para normalizar essa métrica:

$$\kappa = \frac{COP}{1 + COP}. \quad (5.27)$$

Essa formulação restringe κ ao intervalo $0 < \kappa < 1$. À medida que o COP tende a zero, κ também tende a zero, enquanto que, quando o COP cresce infinitamente, κ se aproxima da unidade. Notavelmente, um $COP = 1$ corresponde a $\kappa = 0.5$. Essa métrica normalizada nos permite definir a eficiência térmica para todos os modos operacionais dentro de um intervalo consistente de 0 a 1, em que 0 significa o pior desempenho e 1 representa o desempenho ideal (ZHANG et al., 2007). Essa definição é aplicável ao refrigerador, aquecedor e acelerador, cada um descrito na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 – Característica do trabalho e calor permitidos pela segunda lei da termodinâmica. O sinal (+) indica trabalho realizado pelo sistema e calor absorvido; (−) indica trabalho realizado sobre o sistema e calor liberado. Notas: W_{net} = trabalho líquido; Q_{in} = calor recebido pelo sistema; Q_{out} = calor cedido pelo sistema.

Modo de operação	W_{net}	Q_{in}	Q_{out}	Eficiência térmica
Motor térmico	+	+	−	$\eta = \frac{W_{net}}{Q_{in}}$
Refrigerador	−	−	+	$COP = \frac{Q_{in}}{W_{net}}$
Aquecedor	−	−	−	$COP = \frac{Q_{out}}{W_{net}}$
Acelerador	−	+	−	$COP = \frac{Q_{out}}{W_{net}}$

Fonte: Autor.

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, apresentamos e discutimos os principais resultados referentes aos modos operacionais e ao desempenho da máquina de Stirling quântica. Neste trabalho, restringimos nossa análise ao caso em que o parâmetro de tunelamento t , a dessintonia entre pontos quânticos ε e o campo magnético transversal B_x permanecem constantes ao longo de todo o ciclo.

6.1 Energias Próprias

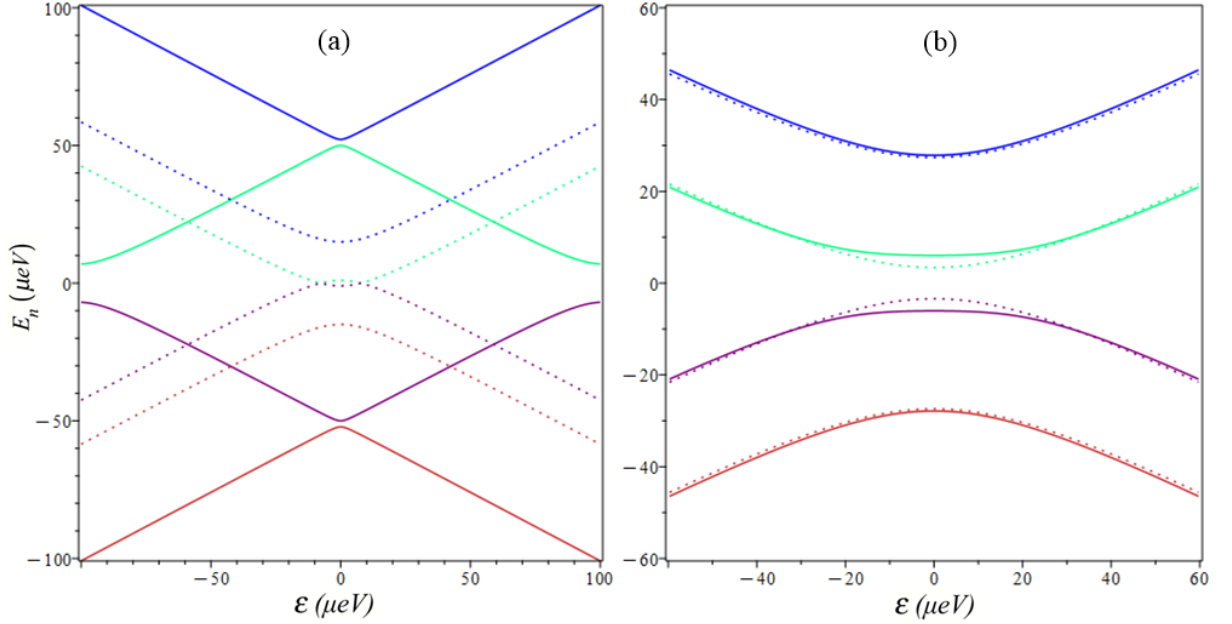
As energias próprias correspondem aos autovalores da Hamiltoniana do sistema, representando os possíveis valores de energia que podem ser medidos em um estado estacionário. Em outras palavras, cada energia própria está associada a um estado quântico estável descrito por uma autofunção da Hamiltoniana (SAKURAI, 1994). A forma como essas energias variam com parâmetros externos, como o campo magnético B e o desnível energético ε , influencia diretamente o comportamento termodinâmico do sistema, como absorção de calor, realização de trabalho e regime operacional (LEITÃO; ROJAS; ROJAS, 2025).

Aqui, consideramos dois conjuntos distintos de parâmetros: um baseado em valores experimentais, extraídos de (BENITO et al., 2017), e outro definido teoricamente para nossas análises. Os parâmetros experimentais são $B_z = 24 \mu\text{eV}$, $B_x = 10 \mu\text{eV}$ e $t = 15,4 \mu\text{eV}$. Por outro lado, os parâmetros teóricos adotados foram $B_z = 16 \mu\text{eV}$, $B_x = 100 \mu\text{eV}$ e $t = 7 \mu\text{eV}$. Para simplificar as análises, adotamos unidades naturais, com $K_B = 1$, de modo que a temperatura e a energia são expressas na mesma unidade. A intenção é utilizar ambos os conjuntos para possibilitar comparações entre os resultados teóricos e aqueles baseados em dados experimentais.

A Fig. 6.1 apresenta os espectros de energia E_n como função do desnível energético ε . Na Fig. 6.1(a), utilizamos os parâmetros teóricos $B_z = 16 \mu\text{eV}$, $t = 7 \mu\text{eV}$ e $B_x = 100 \mu\text{eV}$ para as curvas contínuas, enquanto $B_x = 0$ gera as curvas tracejadas. Observa-se que as curvas contínuas apresentam comportamento qualitativamente distinto: há um anticruzamento entre E_3 e E_4 próximo a $\varepsilon \approx \pm 100 \mu\text{eV}$, além de anticruzamentos adicionais entre E_1 e E_3 , e entre E_2 e E_4 , localizados em $\varepsilon = 0$. Já no caso de $B_x = 0$, nota-se uma degenerescência entre os níveis E_3 e E_4 em $\varepsilon = \pm 2\sqrt{15} \mu\text{eV}$.

Por sua vez, a Fig. 6.1(b) corresponde aos parâmetros experimentais, com $B_z = 24\mu\text{eV}$, $t = 15,4\mu\text{eV}$ e $B_x = 10\mu\text{eV}$ nas curvas contínuas, enquanto o caso $B_x = 0$ está representado pelas curvas tracejadas. Neste cenário, ambas as curvas apresentam comportamentos semelhantes em grande parte do domínio de ε , com exceção da região em torno de $\varepsilon \approx \pm 25\mu\text{eV}$, onde ocorre um anticruzamento mais acentuado quando o campo transversal está presente ($B_x \neq 0$).

Figura 6.1 – Curvas das energias E_n ($n = 1, 2, 3, 4$) em função do desnível energético ε . (a) Parâmetros teóricos: $B_z = 16\mu\text{eV}$, $t = 7\mu\text{eV}$, com $B_x = 100\mu\text{eV}$ (contínuo) e $B_x = 0$ (tracejado). (b) Parâmetros experimentais: $B_z = 24\mu\text{eV}$, $t = 15,4\mu\text{eV}$, com $B_x = 10\mu\text{eV}$ (contínuo) e $B_x = 0$ (tracejado).



Fonte: Autor

6.2 Populações

Agora investigaremos o comportamento térmico das populações dos níveis de energia do sistema, considerando um elétron confinado em um sistema de ponto quântico duplo (DQD), acoplado por tunelamento e sujeito a campos magnéticos nas direções longitudinal (B_z) e transversal (B_x). A análise é realizada a partir das expressões analíticas da matriz densidade térmica $\rho(T)$, obtidas com base nos autoestados e autovalores da Hamiltoniana do sistema (LEITÃO; ROJAS; ROJAS, 2025). Os resultados

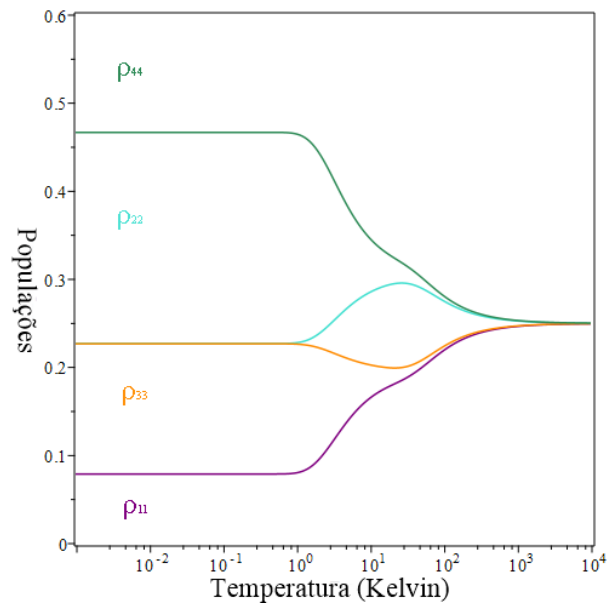
aqui apresentados correspondem às componentes diagonais da matriz densidade, ou seja, ρ_{11} , ρ_{22} , ρ_{33} e ρ_{44} , que representam as populações dos estados próprios do sistema.

Na Figura 6.2, correspondente a $\varepsilon = 2.0$, observa-se que, em temperaturas muito baixas ($T \ll 1$), o estado ρ_{44} é o mais populado, com valor próximo de 0,5, indicando que este é o estado fundamental. As demais populações são significativamente menores, com $\rho_{11} \approx 0,1$. À medida que a temperatura aumenta, ocorre redistribuição térmica das populações. Nota-se uma inversão populacional entre os níveis ρ_{22} e ρ_{33} . Para altas temperaturas ($T \gg 1$), todas as populações convergem para o valor 0,25, como esperado para o regime de equilíbrio térmico completo.

Na Figura 6.3, com $\varepsilon = 0.5$, a assimetria entre os poços é menor, refletindo-se em populações mais equilibradas mesmo em baixas temperaturas. O estado ρ_{44} ainda possui a maior população, mas com valor inferior ao do caso anterior. Além disso, não ocorre inversão populacional significativa entre ρ_{22} e ρ_{33} , o que indica menor diferenciação energética entre os estados. Em altas temperaturas, as populações novamente tendem à equipartição.

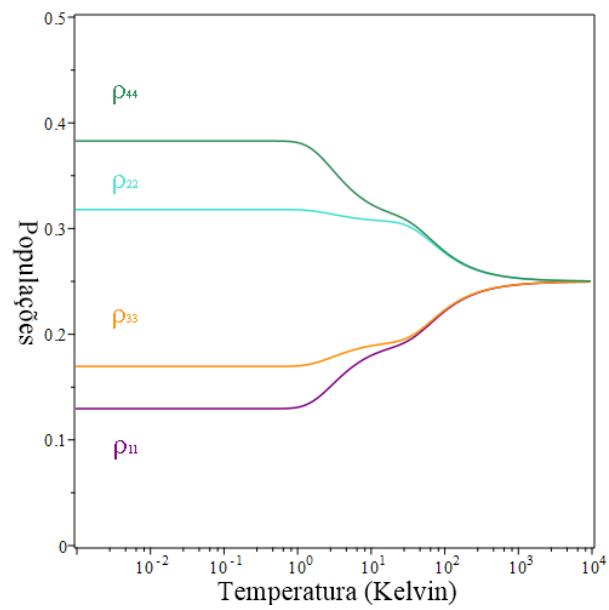
Esses resultados são consistentes com os obtidos por Leitão *et al.* (LEITÃO; ROJAS; ROJAS, 2025), que destacam a influência do parâmetro ε na distribuição das populações e na possível ocorrência de inversão populacional. A dependência térmica das populações fornece uma ferramenta útil para compreender a dinâmica do sistema, evidenciando o papel do desbalanço interpoço como parâmetro de controle quântico em dispositivos de ponto quântico duplo.

Figura 6.2 – Populações em função da temperatura para $\varepsilon = 2.0 \mu\text{eV}$, com $B_z = 24 \mu\text{eV}$, $B_x = 100 \mu\text{eV}$, $t = 10 \mu\text{eV}$.



Fonte: Autor.

Figura 6.3 – Populações em função da temperatura para $\varepsilon = 0.5 \mu\text{eV}$, com $B_z = 24 \mu\text{eV}$, $B_x = 100 \mu\text{eV}$, $t = 10 \mu\text{eV}$.



Fonte: Autor.

6.3 Ciclo sem Regenerador

A análise do comportamento energético no ciclo de Stirling permite compreender como a variação dos campos magnéticos e das temperaturas dos reservatórios térmicos conduz à transição entre diferentes regimes de operação, como motor, refrigerador, aquecedor e acelerador térmico. A caracterização desses modos, associada à avaliação da eficiência por parâmetros normalizados, evidencia tanto as condições de maior desempenho quanto os limites dissipativos do ciclo. Dessa forma, esse estudo não apenas descreve a versatilidade do sistema frente a diferentes combinações de parâmetros externos, mas também fornece subsídios para estratégias de otimização energética em máquinas térmicas quânticas (HUANG et al., 2014).

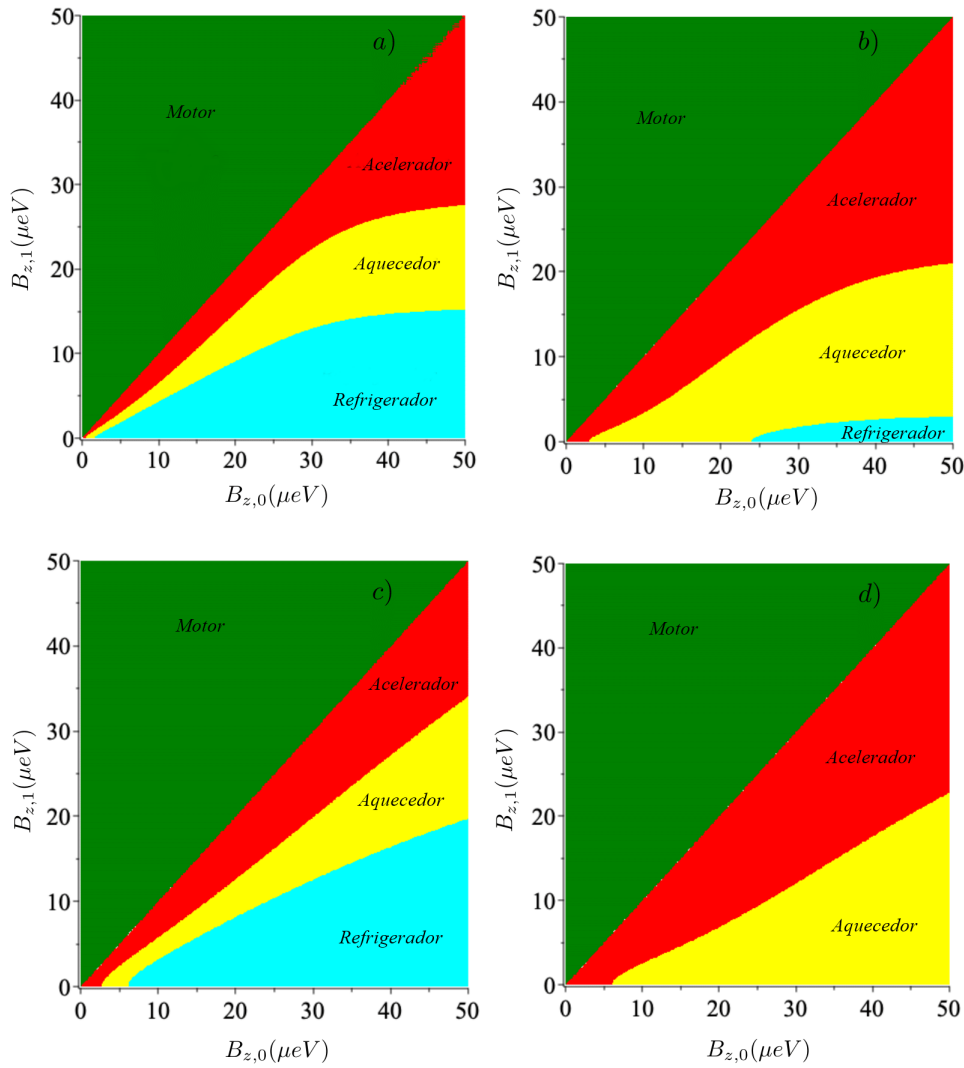
6.3.1 Análise dos Modos Operacionais do Ciclo de Stirling Quântico sem Regenerador

A Figura 6.4 ilustra os modos operacionais de um ciclo de Stirling quântico no plano $(B_{z,0}, B_{z,1})$, onde $B_{z,0}$ e $B_{z,1}$ correspondem aos campos magnéticos longitudinais aplicados durante os dois processos isocóricos do ciclo, respectivamente. O código de cores identifica os quatro regimes termodinâmicos distintos: motor (verde), acelerador térmico (vermelho), aquecedor (amarelo) e refrigerador (ciano). As figuras apresentam resultados para diferentes combinações do campo magnético transversal B_x e temperaturas dos reservatórios, mantendo fixos $\varepsilon = 1 \mu\text{eV}$ e $t = 15.4 \mu\text{eV}$.

Na Figura 6.4 (a), para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2 \mu\text{eV}$, o regime de motor domina o semiplano $B_{z,1} > B_{z,0}$, refletindo a extração eficiente de trabalho quando o campo magnético final excede o inicial. O modo refrigerador surge para $B_{z,0} > B_{z,1}$, delimitado por uma ampla região ciano, indicando uma grande janela operacional para refrigeração em baixo gradiente térmico. Uma estreita faixa amarela (aquecedor) separa o refrigerador do acelerador, correspondendo a uma operação dominada pela dissipação de calor sem produção líquida de trabalho. O acelerador térmico ocupa a região superior direita ($B_{z,0} > B_{z,1}$), sendo limitado pela zona de aquecimento, indicando condições sob as quais tanto trabalho quanto calor são injetados no sistema.

Para a Figura 6.4 (b), para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6 \mu\text{eV}$, o aumento da temperatura do reservatório quente expande o regime de motor, empurrando suas fronteiras operacionais mais

Figura 6.4 – Modos operacionais do ciclo de Stirling quântico no plano $(B_{z,0}, B_{z,1})$ para diferentes configurações de parâmetros. (a) Para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2 \mu\text{eV}$. (b) Para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6 \mu\text{eV}$. (c) Para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2 \mu\text{eV}$. (d) Para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6 \mu\text{eV}$. Os parâmetros fixos são $\varepsilon = 1 \mu\text{eV}$ e $t = 15.4 \mu\text{eV}$.



Fonte: Autor.

profundamente para dentro do setor $B_{z,0} > B_{z,1}$. Essa expansão é acompanhada por uma supressão pronunciada do modo refrigerador, agora confinado a uma pequena região ciano em altos valores de $B_{z,0}$. O modo aquecedor torna-se significativamente mais proeminente, refletindo o aumento da entropia.

No regime da Figura 6.4 (c), com $B_x = 60, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2, \mu\text{eV}$, o regime de motor volta a dominar o semiplano $B_{z,1} > B_{z,0}$, mas a região correspondente ao refrigerador torna-se mais ampla em comparação à Figura 6.4 (a), estendendo-se para valores menores de $B_{z,0}$. A região de aquecedor permanece estreita, enquanto o modo de acelerador mantém um comportamento semelhante ao da Figura 6.4 (a), embora sua fronteira sofra um leve deslocamento devido ao campo transversal mais intenso.

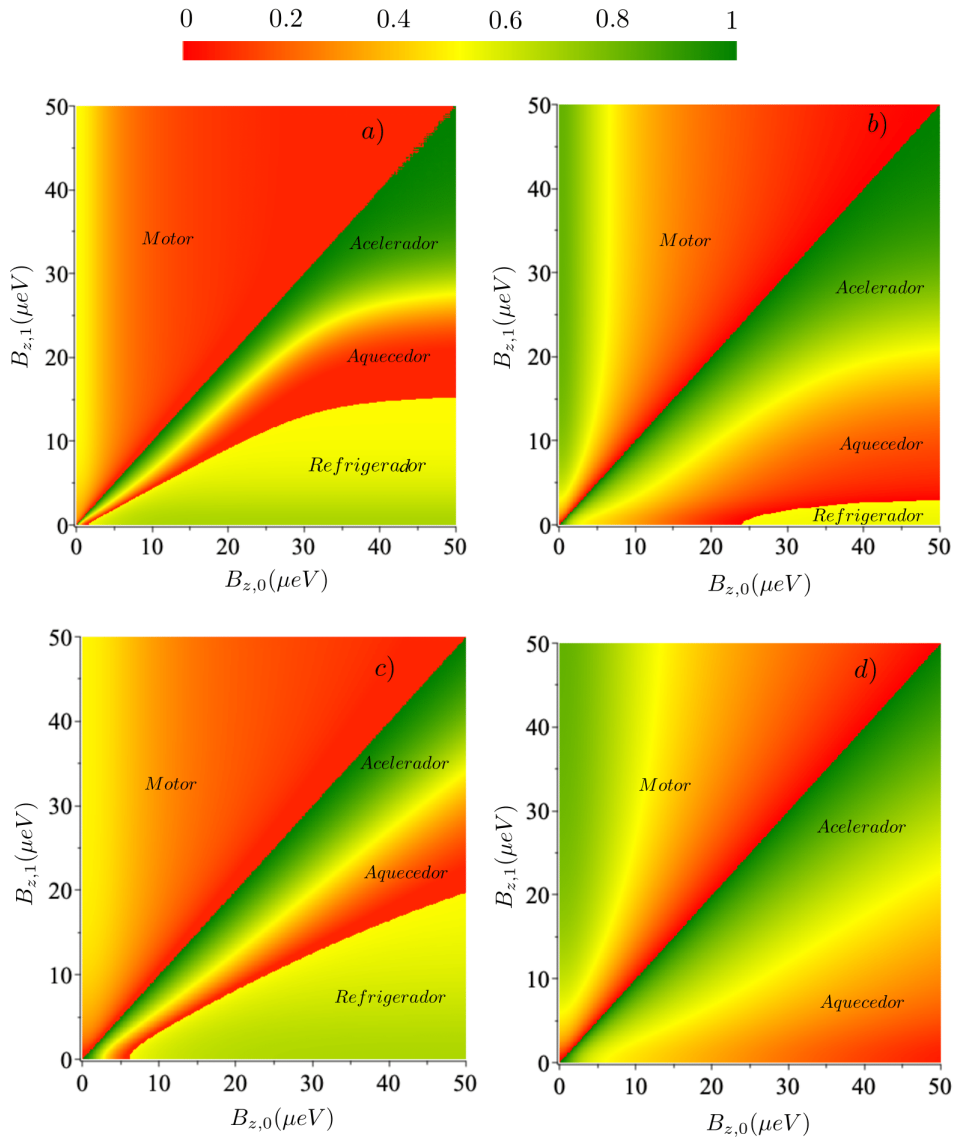
Já a figura 6.4 (d), corresponde a $B_x = 60, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6, \mu\text{eV}$. Nessa configuração, caracterizada pela combinação de um campo transversal intenso e de um gradiente térmico acentuado, observa-se o cenário de maior assimetria do sistema. A região associada ao motor térmico domina o plano onde $B_{z,1} > B_{z,0}$. Em contrapartida, a região do refrigerador é completamente suprimida até que valores elevados de $B_{z,0}$ sejam atingidos, confirmando que uma temperatura T_{hot} mais alta inibe o resfriamento. A região de aquecedor torna-se mais proeminente no domínio em que $B_{z,0} > B_{z,1}$, indicando um aumento na dissipação irreversível de calor. Por fim, a janela operacional do acelerador térmico é ampliada em comparação aos cenários de baixo T_{hot} .

6.3.2 Mapas de Eficiência do Ciclo de Stirling Quântico sem Regenerador

A Figura 6.5 apresenta os mapas de eficiência do ciclo de Stirling quântico no espaço de parâmetros $(B_{z,0}, B_{z,1})$, para diferentes valores do campo transversal B_x e gradiente térmico. A escala de cores no topo indica o parâmetro de eficiência κ , variando de 0 a 1. Para o motor térmico, κ coincide com a eficiência termodinâmica η , enquanto para os regimes de refrigerador, acelerador térmico e aquecedor, κ é definido através do coeficiente de performance normalizado $\kappa = \frac{COP}{1+COP}$. Essa normalização permite a comparação direta da eficiência entre todos os modos operacionais.

Na Figura 6.5 (a), para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$ e $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$, o regime de motor térmico domina o quadrante superior esquerdo do diagrama ($B_{z,1} > B_{z,0}$). Nessa região, a eficiência η apresenta um gradiente de cores do vermelho ao laranja, com a eficiência máxima $\eta \approx 0.5$ sendo alcançada para baixos valores de $B_{z,0}$. Esse resultado sugere que as condições ótimas de extração de trabalho ocorrem em regimes de campo magnético fraco, onde o motor térmico apresenta desempenho intermediário. O setor inferior direito ($B_{z,1} > B_{z,0}$) corresponde à região de refrigerador, identificada por tons de amarelo

Figura 6.5 – Representação esquemática da eficiência térmica do ciclo de Stirling quântico no espaço de parâmetros $B_{z,0} - B_{z,1}$ para diferentes configurações. (a) $B_x = 10, \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2, \mu\text{eV}$. (b) $B_x = 10, \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6, \mu\text{eV}$. (c) $B_x = 60, \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2, \mu\text{eV}$. (d) $B_x = 60, \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6, \mu\text{eV}$. Os parâmetros fixos do sistema são $\varepsilon = 1, \mu\text{eV}$ e $t = 15.4, \mu\text{eV}$.



Fonte: Autor.

a verde-claro, indicando valores relativamente altos do coeficiente κ . Entre os domínios de refrigerador e acelerador, observa-se uma região bem definida de aquecedor, com baixo desempenho termodinâmico. Por fim, no domínio $B_{z,0} > B_{z,1}$, surge o acelerador térmico, caracterizado por um gradiente de cores do

amarelo ao verde. Os valores mais significativos de κ são observados próximos à fronteira com a região de motor.

Na Figura 6.5 (b), para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$ e $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$, o aumento do gradiente de temperatura modifica significativamente o panorama operacional do sistema. Observa-se uma melhora notável na eficiência do motor térmico, com expansão das regiões verdes no setor $B_{z,1} > B_{z,0}$, onde a eficiência η atinge valores próximos de 0.8. Esse aumento do gradiente térmico resulta em uma melhora substancial no desempenho do motor. Em contraste, a região de refrigeração sofre uma redução drástica, ficando restrita apenas a altos valores de $B_{z,0}$ e $B_{z,1}$, com desempenho significativamente comprometido ($\kappa \approx 0.5$). Simultaneamente, o regime de aquecimento torna-se mais proeminente, ocupando uma área considerável entre as regiões de acelerador e refrigerador. Finalmente, no quadrante $B_{z,0} > B_{z,1}$, o acelerador mantém altos valores do coeficiente κ .

Na Figura 6.5 (c), com parâmetros $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$ e $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$, observa-se que o aumento significativo do campo transversal B_x modifica a estrutura dos regimes operacionais em comparação à Figura 6.5 (a). Nota-se que a eficiência do motor térmico aumenta, evidenciada pela expansão da região em tons de amarelo e laranja dentro da zona de motor. Isso indica que uma maior variedade de combinações $(B_{z,0}, B_{z,1})$ leva a valores intermediários de eficiência, ampliando a área operacional do motor. Contudo, apesar dessa melhora, o motor permanece limitado a níveis médios de desempenho, sem alcançar a eficiência ótima. Além disso, a região de refrigerador (faixa amarela na parte inferior) persiste, mas deslocada e com contornos mais definidos, refletindo o papel de B_x na reconfiguração do espectro de energia. O regime acelerador, por sua vez, permanece associado à região próxima da diagonal, mas com extensão e intensidade reduzidas em verde, sinalizando que o aumento de B_x não favorece diretamente o coeficiente de performance κ . Enquanto isso, o regime aquecedor persiste como uma faixa intermediária, separando motor e refrigerador, mas agora mais larga em comparação à Figura 6.5 (a), indicando que a dissipação de energia em ambos os reservatórios se torna mais provável sob campos transversais intensos.

Finalmente, na Figura 6.5 (d), para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$ e $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$, observa-se que o efeito combinado de um campo magnético transversal forte e o aumento da temperatura do reservatório quente leva a um aprimoramento significativo da eficiência do motor. A região de motor exibe áreas mais

amplas em tons de amarelo e laranja, indicando alta eficiência, e, adicionalmente, surgem sub-regiões em verde, correspondendo a desempenhos próximos ao limite máximo normalizado. Esse resultado mostra que o aumento de T_{hot} é um fator-chave para viabilizar regimes de alta eficiência quando combinado a um forte B_x . Por outro lado, o domínio de refrigerador desaparece completamente, pois a elevação de T_{hot} , juntamente com o campo transversal intenso, desloca as fronteiras do diagrama de tal forma que o bombeamento de calor do reservatório frio para o quente torna-se inacessível dentro do espaço de parâmetros explorado. O acelerador torna-se mais definido ao longo da diagonal, exibindo os maiores valores do coeficiente κ , enquanto o aquecedor persiste como uma ampla faixa dissipativa, embora com desempenho reduzido em comparação ao observado na Figura 6.5 (c).

6.4 Ciclo com Regenerador

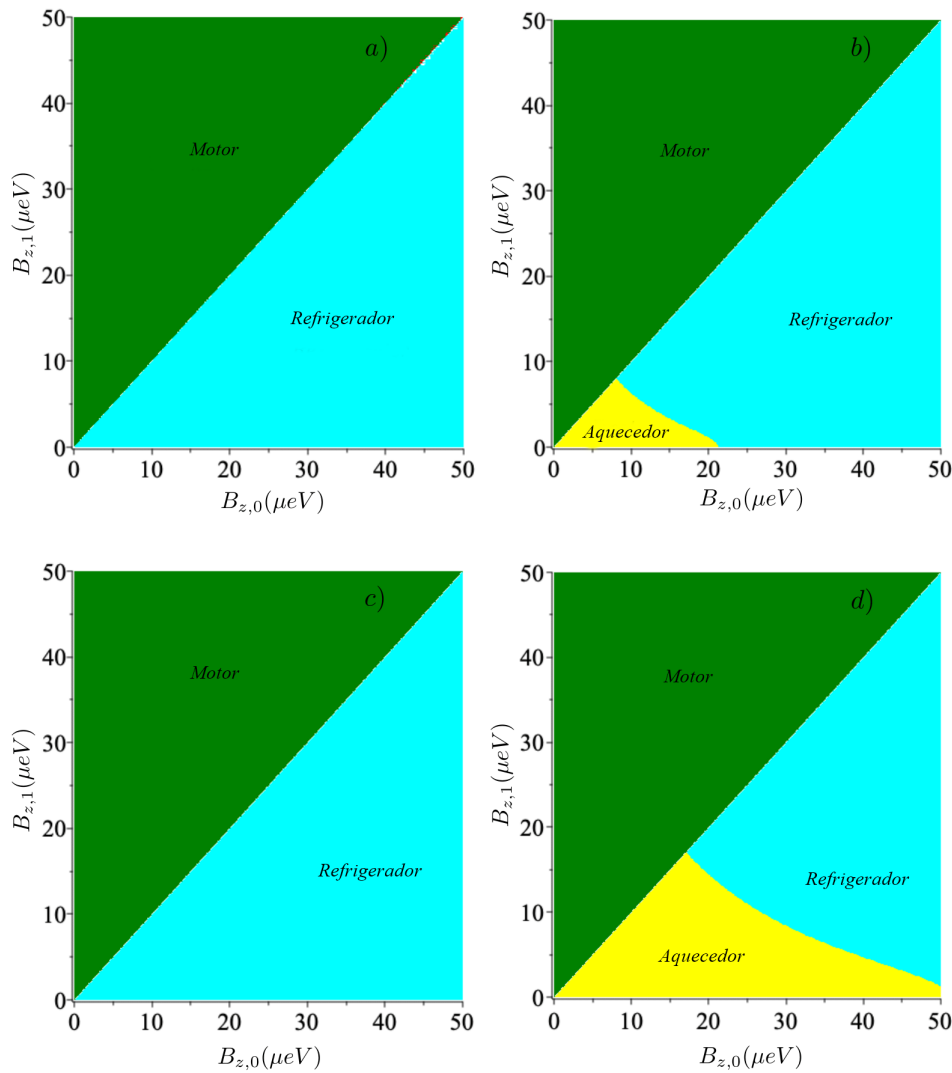
A inclusão do regenerador no ciclo de Stirling quântico representa um avanço fundamental na otimização do desempenho termodinâmico. Esse elemento permite o reaproveitamento parcial do calor trocado entre os estágios do ciclo, reduzindo perdas energéticas e ampliando a eficiência global do sistema. A análise dos diferentes regimes de funcionamento, associada à avaliação da eficiência em condições regenerativas, revela cenários em que a conversão de calor em trabalho ou o bombeamento térmico são potencializados. Assim, o estudo do ciclo com regenerador destaca não apenas a superioridade desse arranjo frente ao modelo sem regeneração, mas também a relevância do controle preciso dos parâmetros externos para explorar regimes de operação de alto desempenho em máquinas térmicas quânticas (HUANG et al., 2014).

6.4.1 Análise dos Modos Operacionais do Ciclo de Stirling Quântico com Regenerador

A Figura 6.6 apresenta os diferentes regimes operacionais do ciclo de Stirling quântico com regenerador no plano $(B_{z,0}, B_{z,1})$, em que $B_{z,0}$ e $B_{z,1}$ representam os campos magnéticos aplicados em diferentes estágios do ciclo. Cada painel corresponde a uma configuração específica dos parâmetros externos, enquanto as cores identificam os distintos modos operacionais.

No caso da Figura 6.6(a), para $B_x = 10, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2, \mu\text{eV}$, o diagrama é dominado por dois regimes bem definidos: o de refrigerador e o de motor térmico. A fronteira entre

Figura 6.6 – Modos operacionais do ciclo de Stirling quântico com regenerador no plano $(B_{z,0}, B_{z,1})$ para diferentes configurações de parâmetros. (a) Para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2 \mu\text{eV}$. (b) Para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6 \mu\text{eV}$. (c) Para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2 \mu\text{eV}$. (d) Para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6 \mu\text{eV}$. Os parâmetros fixos são $\varepsilon = 1 \mu\text{eV}$ e $t = 15.4 \mu\text{eV}$.



Fonte: Autor.

esses regimes é aproximadamente dada pela linha diagonal $B_{z,0} = B_{z,1}$. Para valores maiores de $B_{z,0}$ prevalece o regime de refrigerador, enquanto para valores mais elevados de $B_{z,1}$ a máquina opera como motor térmico. Nessa configuração, a região associada ao aquecedor não se manifesta.

Já a Figura 6.6 (b), mantendo $B_x = 10, \mu\text{eV}$ e $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$, mas elevando a temperatura do reservatório quente para $T_{hot} = 6, \mu\text{eV}$, revela o surgimento de uma nova região amarela correspondente ao regime de aquecedor, localizada em baixos valores de $B_{z,0}$ e $B_{z,1}$. Esse resultado mostra que o aumento da diferença de temperatura amplia o espectro de regimes operacionais, permitindo a coexistência dos três modos: motor térmico, refrigerador e aquecedor.

Na Figura 6.6 (c), correspondente a $B_x = 60, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2, \mu\text{eV}$, observa-se uma estrutura semelhante à apresentada na Figura 6.6 (a), com apenas dois regimes operacionais: refrigerador e motor térmico. O aumento do campo magnético transversal B_x intensifica a competição entre esses modos, mas não chega a induzir o surgimento da região do aquecedor.

Por sua vez, a Figura 6.6 (d), para $B_x = 60, \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1, \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6, \mu\text{eV}$, evidencia a predominância do regime de aquecedor, que ocupa uma ampla região do diagrama, sobretudo para valores intermediários de $B_{z,0}$ e $B_{z,1}$. Esse comportamento contrasta com o observado na Figura 6.6 (c) e demonstra que a combinação de um campo transversal intenso com um gradiente térmico elevado favorece fortemente o modo aquecedor, reduzindo proporcionalmente as áreas associadas aos regimes de motor térmico e refrigerador.

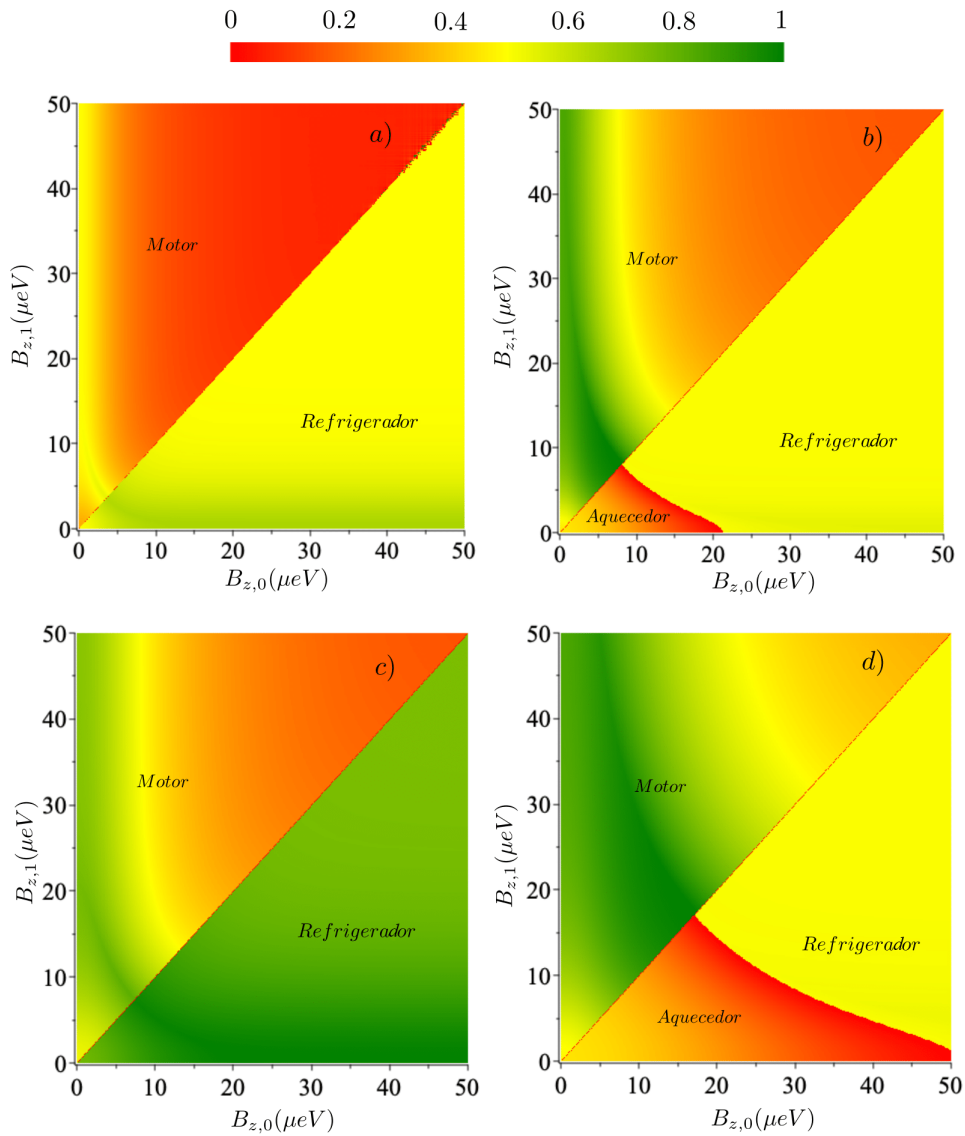
Assim, a Figura 6.6 mostra de forma clara como a variação dos parâmetros externos, como o campo magnético transversal B_x e as temperaturas dos reservatórios, afeta qualitativamente os regimes operacionais do ciclo de Stirling quântico com regenerador. A análise combinada indica que o aumento da diferença de temperatura favorece o surgimento do modo aquecedor, enquanto o valor de B_x modula a extensão relativa das regiões de motor térmico e refrigerador, resultando em um diagrama de fases mais rico.

6.4.2 Mapas de Eficiência do Ciclo de Stirling Quântico com Regenerador

A Figura 6.7 apresenta os mapas da eficiência térmica η e do coeficiente de desempenho normalizado κ para o ciclo de Stirling quântico com regenerador no plano $(B_{z,0}, B_{z,1})$ dos campos magnéticos longitudinais, para diversas configurações dos parâmetros do ciclo.

Na Figura 6.7 (a), para $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$, observa-se a coexistência de dois regimes operacionais distintos: motor térmico e refrigerador.

Figura 6.7 – Eficiência térmica do ciclo de Stirling quântico com regenerador no espaço de parâmetros $B_{z,0} - B_{z,1}$ para diferentes configurações. (a) $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2 \mu\text{eV}$. (b) $B_x = 10 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6 \mu\text{eV}$. (c) $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 2 \mu\text{eV}$. (d) $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{\text{cold}} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{\text{hot}} = 6 \mu\text{eV}$. Os parâmetros fixos do sistema são $\varepsilon = 1 \mu\text{eV}$ e $t = 15.4 \mu\text{eV}$.



Fonte: Autor.

A região de motor térmico apresenta baixos valores de eficiência, predominantemente em tons avermelhados, com uma faixa estreita onde a eficiência atinge $\eta \approx 0.5$, localizada principalmente em campos longitudinais fracos $B_{z,0}$. Já a região de refrigerador apresenta coeficientes de desempenho in-

intermediários, com $\kappa \approx 0.5$ (tons amarelados), e para baixos valores de $B_{z,1}$, o coeficiente de desempenho chega a $\kappa \approx 0.6$.

Na Figura 6.7 (b), mantendo $B_x = 10 \mu\text{eV}$ e aumentando a temperatura do reservatório quente para $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$, observa-se um aumento substancial na eficiência do motor térmico. Esse aprimoramento é evidenciado pelo surgimento de regiões esverdeadas no regime de motor, indicando desempenho próximo ao limite máximo normalizado. Adicionalmente, o diagrama revela o aparecimento de uma nova região associada ao aquecedor, caracterizada por valores de κ próximos de zero (tons avermelhados), confirmando seu caráter altamente dissipativo. Em contraste, a região ocupada pelo refrigerador é significativamente reduzida em comparação à Figura 6.7 (a), destacando que o aumento de T_{hot} favorece fortemente a eficiência do motor térmico em detrimento dos demais regimes operacionais. A comparação entre as Figuras 6.7 (a) e (b) demonstra claramente o impacto do aumento da temperatura do reservatório quente T_{hot} : não apenas a eficiência do motor é elevada, mas também o diagrama de regimes operacionais é qualitativamente alterado.

Na Figura 6.7 (c), para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 2 \mu\text{eV}$, o aumento do campo transversal leva a uma melhora substancial em comparação com a Figura 6.7 (a). A região do motor expande-se significativamente e apresenta uma ampla área em tons esverdeados, indicando altas eficiências que alcançam valores de até $\eta \approx 0.8$ sob condições mais favoráveis. Simultaneamente, o regime de refrigerador também é consideravelmente aprimorado: o coeficiente de desempenho normalizado aumenta de forma expressiva em relação à Figura 6.7 (a), ocupando uma região maior no diagrama e atingindo valores máximos da ordem de $\kappa \approx 0.9$. No entanto, não é observada a emergência do modo aquecedor nesta figura.

Em resumo, o caso (c) demonstra que um campo transversal forte eleva simultaneamente tanto a eficiência do motor quanto o desempenho do refrigerador.

Por fim, na Figura 6.7 (d), para $B_x = 60 \mu\text{eV}$, $T_{cold} = 1 \mu\text{eV}$ e $T_{hot} = 6 \mu\text{eV}$, o efeito combinado de um campo transversal intenso e de uma alta temperatura do reservatório quente resulta em um aumento significativo na eficiência do motor. A região correspondente ao regime de motor expande-se em extensas áreas esverdeadas, indicando eficiências próximas ao limite máximo normalizado. O regime de refrigerador, embora ainda presente, tem sua área reduzida pelo surgimento do modo aquecedor e apre-

sentam um declínio acentuado no desempenho, com coeficiente de desempenho limitado a $\kappa \approx 0.5$, em contraste com os valores mais elevados observados na Figura 6.7 (c). O modo aquecedor aparece como uma ampla faixa em tons vermelhos e amarelados, característico de um baixo coeficiente de desempenho e de comportamento essencialmente dissipativo.

7 CONCLUSÕES

O presente trabalho visou investigar o comportamento energético e termodinâmico de um sistema de ponto quântico duplo submetido a campos magnéticos longitudinais e transversais, considerando ciclos de Stirling quânticos com e sem regenerador. A análise das energias próprias evidenciou anticruzamentos sensíveis ao campo transversal B_x e ao desnível energético ε , indicando a possibilidade de controle quântico das transições entre níveis de energia.

As populações térmicas, obtidas a partir da matriz densidade, mostraram redistribuição populacional dependente de ε e da temperatura, com inversão populacional em casos de maior assimetria entre os poços, evidenciando o papel do desbalanço interpoço como parâmetro de controle.

Os mapas de regimes operacionais e eficiência do ciclo de Stirling sem regenerador mostraram que a combinação de campos magnéticos e gradientes térmicos permite transitar entre motor, refrigerador, aquecedor e acelerador térmico. A presença de um campo transversal intenso e altas diferenças de temperatura amplifica a eficiência do motor, enquanto restringe o desempenho de refrigeração. A inclusão do regenerador intensificou a eficiência global do ciclo, promovendo o reaproveitamento do calor e modificando a distribuição dos regimes operacionais.

Em síntese, os resultados demonstram que a manipulação precisa dos parâmetros externos permite controlar a dinâmica energética e otimizar a eficiência em ciclos quânticos de Stirling, fornecendo subsídios importantes para o projeto de máquinas térmicas quânticas de alto desempenho.

REFERÊNCIAS

- ALICKI, R. The quantum open system as a model of the heat engine. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 12, n. 5, p. L103, 1979.
- ANDRESEN, B.; SALAMON, P.; BERRY, R. S. Thermodynamics in finite time. **Physics today**, American Institute of Physics, v. 37, n. 9, p. 62–70, 1984.
- BAUMGRATZ, T.; CRAMER, M.; PLENIO, M. B. Quantifying coherence. **Physical Review Letters**, APS, v. 113, n. 14, p. 140401, 2014.
- BAYERBACH, M. J. et al. Bell-state measurement exceeding 50% success probability with linear optics. **Science Advances**, American Association for the Advancement of Science, v. 9, n. 32, p. eadf4080, 2023.
- BELL, J. S. On the Einstein – Podolsky – Rosen paradox. **Physics Physique ika**, American Physical Society, v. 1, n. 3, p. 195–200, 1964.
- BENITO, M. et al. Input-output theory for spin-photon coupling in si double quantum dots. **Physical Review B**, APS, v. 96, n. 23, p. 235434, 2017.
- BHATTACHARYA, S. et al. Collective advantage mediated by dissipation in quantum heat engines. **arXiv preprint arXiv:2310.01938**, 2023.
- BINDER, F. et al. (Ed.). **Thermodynamics in the Quantum Regime: Fundamental Aspects and New Directions**. Cham, Switzerland: Springer, 2018. v. 195. (Fundamental Theories of Physics, v. 195). ISBN 978-3-319-99045-3.
- BRUS, L. E. Electron–electron and electron-hole interactions in small semiconductor crystallites: The size dependence of the lowest excited electronic state. **The Journal of chemical physics**, American Institute of Physics, v. 80, n. 9, p. 4403–4409, 1984.
- CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics**. [S.l.]: John wiley & sons, 1991.
- CANGEMI, L. M.; BHADRA, C.; LEVY, A. Quantum engines and refrigerators. **Physics Reports**, Elsevier, v. 1087, p. 1–71, 2024.
- CHAVES, C. R. Síntese, silanização e caracterização de pontos quânticos de cdte/cds e cds/cd (oh) 2 para aplicações em sistemas biológicos. 2011.
- CLAUSIUS, R. **The Mechanical Theory of Heat**. London: Macmillan, 1879.
- DAHBI, Z. et al. Effect of induced transition on the quantum entanglement and coherence in two-coupled double quantum dot system. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 535, n. 3, p. 2200537, 2023.

- DEFFNER, S.; CAMPBELL, S. **Quantum Thermodynamics: An Introduction to the Thermodynamics of Quantum Information**. [S.l.]: Morgan & Claypool Publishers, 2019. (IOP Concise Physics). ISBN 978-1-64327-655-7.
- DIRAC, P. A. M. **The Principles of Quantum Mechanics**. [S.l.]: Oxford University Press, 1930.
- DIRAC, P. A. M. **The Principles of Quantum Mechanics**. Oxford: Oxford University Press, 1930.
- DOTY, M. et al. Antibonding ground states in inas quantum-dot molecules. **Physical review letters**, APS, v. 102, n. 4, p. 047401, 2009.
- EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Physical Review**, American Physical Society, v. 47, p. 777–780, 1935.
- EKIMOV, A. I.; EFROS, A. L.; ONUSHCHENKO, A. A. Quantum size effect in semiconductor microcrystals. **Solid State Communications**, Elsevier, v. 56, n. 11, p. 921–924, 1985.
- FERREIRA, M.; ROJAS, O.; ROJAS, M. Thermal entanglement and quantum coherence of a single electron in a double quantum dot with rashba interaction. **Physical Review A**, APS, v. 107, n. 5, p. 052408, 2023.
- FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. In: **Feynman and computation**. [S.l.]: cRc Press, 1982. p. 133–153.
- FILGUEIRAS, C.; ROJAS, O.; ROJAS, M. Thermal entanglement and correlated coherence in two coupled double quantum dots systems. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 532, n. 8, p. 2000207, 2020.
- FRIIS, N. Entanglement in quantum information theory. **Nature Reviews Physics**, Nature Publishing Group, v. 1, n. 1, p. 72–87, 2019.
- FUJISAWA, T. et al. Spontaneous emission spectrum in double quantum dot devices. **Nature**, v. 419, p. 278–935, 1998.
- FUJISAWA, T.; TOKURA, Y.; HIRAYAMA, Y. Allowed and forbidden transitions in artificial hydrogen and helium atoms. **Physical Review B**, v. 63, n. 8, p. 081304, 2002.
- GHOSH, A. et al. Quantum thermal machines with coherent heat transfer. **arXiv preprint arXiv:2404.05799**, 2024.
- HAAR, D. T. Theory and applications of the density matrix. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 24, n. 1, p. 304, 1961.
- HAYASHI, T. et al. Coherent manipulation of electronic states in a double quantum dot. **Physical Review Letters**, v. 91, n. 22, p. 226804, 2003.
- HORODECKI, R. et al. Quantum entanglement. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 81, n. 2, p. 865–942, 2009.

HUANG, X.-L. et al. Quantum Stirling heat engine and refrigerator with single and coupled spin systems. **The European Physical Journal D**, Springer, v. 68, p. 1–8, 2014.

HUSSAIN, Z.; TALIB, A. Strengths and weaknesses of quantum computing. **International Journal of Scientific and Engineering Research**, v. 7, 2016.

KEÇECİ, M. **Understanding Quantum Mechanics through Hilbert Spaces: Applications in Quantum Computing**. 2025.

KOSLOFF, R. Quantum thermodynamics: A dynamical viewpoint. **Entropy**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 15, n. 6, p. 2100–2128, 2013.

LEITÃO, V.; ROJAS, O.; ROJAS, M. Thermal quantum correlations of a single electron in a double quantum dot with transverse magnetic field. **Physical Review A**, v. 112, p. 022401, 2025.

LI, P.-D. et al. Experimental demonstration of single-spin stirling engine cycles with enhanced efficiency. **Physical Review A**, APS, v. 111, n. 1, p. L010203, 2025.

LI, R.; HU, X.; YOU, J. Controllable exchange coupling between two singlet-triplet qubits. **Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics**, APS, v. 86, n. 20, p. 205306, 2012.

MAZIERO, J. Entendendo a entropia de Von Neumann. **Revista brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 37, p. 1314, 2015.

NEUMANN, J. von. **Mathematical Foundations of Quantum Mechanics**. Princeton, NJ: Princeton University Press, 1932.

NIELSEN, A. S.; YORK, B. T.; MACDONALD, B. D. Stirling engine regenerators: How to attain over 95% regenerator effectiveness with sub-regenerators and thermal mass ratios. **Applied Energy**, v. 253, p. 113557, 2019.

OLIVEIRA, J. L. D. de; ROJAS, M.; FILGUEIRAS, C. Two coupled double quantum-dot systems as a working substance for heat machines. **Physical Review E**, APS, v. 104, n. 1, p. 014149, 2021.

OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. **Physical Review Letters**, APS, v. 88, n. 1, p. 017901, 2001.

PETTA, J. R. et al. Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 309, n. 5744, p. 2180–2184, 2005.

ROJAS, O.; ROJAS, M. Quantum machines using Cu_3Cu_3 -like compounds modeled by Heisenberg antiferromagnetic in a triangular ring. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 537, n. 2, p. 2400291, 2025.

SAKURAI, J. J. **Advanced Quantum Mechanics**. [S.l.]: Addison-Wesley, 1994.

SCHRÖDINGER, E. Discussion of probability relations between separated systems. **Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v. 31, p. 555–563, 1935.

SCHUMACHER, B.; WESTMORELAND, M.; WOOTTERS, W. K. Limitation on the amount of accessible information in a quantum channel. **Physical Review Letters**, APS, v. 76, n. 18, p. 3452, 1996.

STRELTSOV, A.; ADESSO, G.; PLENIO, M. B. Colloquium: Quantum coherence as a resource. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 89, n. 4, p. 041003, 2017.

THOMSON, W. L. K. On the dynamical theory of heat. **Transactions of the Royal Society of Edinburgh**, v. 20, p. 261–288, 1851.

ZHANG, T. et al. Quantum refrigeration and the coefficient of performance in quantum heat engines. **Physical Review A**, v. 75, p. 062102, 2007.