



Universidade Federal de Goiás  
**Instituto de Física**

ALESSANDRO RAMOS JÚNIOR

# Processos termodinâmicos em um poço de potencial infinito

Goiânia  
2023



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE FÍSICA

## TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR VERSÕES ELETRÔNICAS DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO DE GRADUAÇÃO NO REPOSITÓRIO INSTITUCIONAL DA UFG

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio do Repositório Institucional (RI/UFG), regulamentado pela Resolução CEPEC no 1240/2014, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a Lei no 9.610/98, o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou download, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

O conteúdo dos Trabalhos de Conclusão dos Cursos de Graduação disponibilizado no RI/UFG é de responsabilidade exclusiva dos autores. Ao encaminhar(em) o produto final, o(s) autor(a)(es)(as) e o(a) orientador(a) firmam o compromisso de que o trabalho não contém nenhuma violação de quaisquer direitos autorais ou outro direito de terceiros.

### 1. Identificação do Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação (TCCG)

Nome: Alessandro Ramos Júnior

Título do trabalho: Processos termodinâmicos em um poço de potencial infinito

### 2. Informações de acesso ao documento (este campo deve ser preenchido pelo orientador) Concorda com a liberação total do documento [ X ] SIM [ ] NÃO<sup>1</sup>

[1] Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. Após esse período, a possível disponibilização ocorrerá apenas mediante: a) consulta ao(à)s autor(a)(es)(as) e ao(à) orientador(a); b) novo Termo de Ciência e de Autorização (TECA) assinado e inserido no arquivo do TCCG. O documento não será disponibilizado durante o período de embargo.

#### Casos de embargo:

- Solicitação de registro de patente;
- Submissão de artigo em revista científica;
- Publicação como capítulo de livro.

**Obs.: Este termo deve ser assinado no SEI pelo orientador e pelo autor.**



Documento assinado eletronicamente por **Jefferson Adriany Ribeiro Da Cunha, Professor do Magistério Superior**, em 29/08/2023, às 10:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Alessandro Ramos Júnior, Discente**, em 29/08/2023, às 11:29, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **4001227** e o código CRC **2BC57D9A**.

---

**Referência:** Processo nº 23070.026308/2023-51

SEI nº 4001227

ALESSANDRO RAMOS JÚNIOR

# Processos termodinâmicos em um poço de potencial infinito

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Coordenação do Curso de Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Física.

**Área de pesquisa:** Física Estatística

**Orientador:** Prof. Dr. Jefferson Adriany Ribeiro da Cunha

Goiânia  
2023

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Júnior, Alessandro Ramos

Processos termodinâmicos em um poço de potencial infinito  
[manuscrito] / Alessandro Ramos Júnior. - 2023.

XXXV, 35 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Jefferson Adriany Ribeiro da Cunha.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade  
Federal de Goiás, Instituto de Física (IF), Física, Goiânia, 2023.

Bibliografia. Anexos.

Inclui gráfico, lista de figuras, lista de tabelas.

1. Termodinâmica Quântica. 2. Poço potencial. 3. Processos  
térmicos. I. Cunha, Jefferson Adriany Ribeiro da, orient. II. Título.

CDU 531.21



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE FÍSICA

## ATA DE DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Aos 21 dias do mês de agosto de 2023, a partir das 9h00min, por meio de videoconferência, realizou-se a sessão pública de Defesa de Trabalho de Conclusão de Curso do estudante do curso de Física, Bacharelado, Alessandro Ramos Júnior, matrícula 201609878, para apresentar sua monografia intitulada: **“Processos termodinâmicos em um poço de potencial infinito”**. A banca examinadora foi composta pelos professores Ivo de Almeida Marques (IF/UFG), Norton Gomes de Almeida (IF/UFG) e Jefferson Adriany Ribeiro da Cunha (IF/UFG). A sessão pública de Defesa de TCC foi aberta pelo Presidente da Banca Examinadora, Professor Jefferson Adriany Ribeiro da Cunha (Orientador), que na sequência passou a palavra para o estudante apresentar sua monografia. Após a exposição, a Banca Examinadora realizou a arguição do estudante. Ao finalizar a arguição, a Banca reuniu-se em sessão secreta a fim de concluir o julgamento da monografia. A Banca atribuiu ao estudante a nota **8,8**, este foi **APROVADO** na disciplina de TCC. Proclamados os resultados pelo Professor Jefferson Adriany Ribeiro da Cunha (Presidente), foram encerrados os trabalhos e, para constar, lavrou-se a presente ata que é assinada pelos membros da Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Jefferson Adriany Ribeiro Da Cunha, Professor do Magistério Superior**, em 28/08/2023, às 18:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Norton Gomes De Almeida, Professor do Magistério Superior**, em 29/08/2023, às 08:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ivo De Almeida Marques, Professor do Magistério Superior**, em 29/08/2023, às 11:22, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **3960674** e o código CRC **7F47C335**.

---

# AGRADECIMENTOS

---

A caminhada foi longa e, pessoalmente, não posso dizer que foi particularmente agradável. Durante muito tempo cogitei abandonar o curso e percorrer um caminho mais fácil e quem sabe mais gratificante. Olhando em retrospectiva, entretanto, não me arrependendo das decisões que tomei, não me arrependendo de ter permanecido na física, de ter conhecido quem eu conheci e de ter feito tudo o que eu fiz. Apesar do não arrependimento, não entenda, caro leitor, que sou grato a todos os que participaram da minha jornada, muitas das pessoas (sendo elas alun@s ou professor@s) que marcaram presença minha vida durante esse tempo de graduação deixaram sua marca em minha vida e infelizmente algumas dessas marcas continuarão a existir. Dito isso, existem sim, pessoas que eu sou muitíssimo grato por terem feito parte dessa jornada, infelizmente não posso fazer um agradecimento especial para cada uma dessas pessoas, por isso espero que uma citação em um singelo trabalho de conclusão de curso seja o bastante para essas pessoas saberem o tanto que eu as estimo e o tanto que elas fizeram bem a mim. Por onde começar?

Thiago, acredito que esse tenha sido o nome mais significativo durante a minha graduação, eu sei que fui folgado e um pé no saco durante mais da metade do curso e que eu fui uma má influência para o senhor (já que você não usava chinelo até eu começar a frequentar a sua casa) mas saiba, meu "abigo", que sempre tive sentimentos positivos a respeito do senhor e que, mesmo tendo nos afastado ao longo dos anos, eu desejo tudo de bom e de melhor para você!

Edson, meu chegado, foram tantas festas e farras que acho que entre um copo de mé e outro de pinga eu nunca tive a oportunidade de dizer o tanto que sou grato por tudo o que você fez por mim, seja pela ajuda em relação as matérias da universidade, seja pelos conselhos que o senhor me deu; por ter me aguentado todos esses anos ou ainda por ter me ajudado em assuntos mais... "delicados".

Maykon (também conhecido como Borel) alguns dizem que o senhor foi corrompido quando começou a andar comigo e com o Rafael, pensando aqui, talvez seja verdade, em um outro universo o senhor talvez nunca tenha me conhecido e com isso, talvez, não tenha passado metade das dores de cabeça que passou, mas nesse universo, meu amigo, eu sou muitíssimo grato pela nossa caminhada, por todas as vezes que ficamos no canto da rampa ouvindo jazz (principalmente John Coltrane), sendo sommelier de palheiros (ainda

não superei o trauma do "batutinha") e pensando aleatoriedades.

Apesar de não poder fazer um parágrafo dedicado a cada um espero que Carlão, Igor, João Gabriel, Jheferson, Paulo Estevão (pai de nós todos), Marcus, Murilo chinelo, Gustavo, Ronaldão, José da Paixão (meu avô) e a Maria Aparecida (minha avó) saibam que sou extremamente grato a todos vocês do fundo do meu coração por estarem presentes e terem feito essa caminhada mais tolerável.

Gostaria de fazer um agradecimento especial a alguns professores. Professor Jefferson, muito obrigado por ter me aceitado como seu aluno de iniciação e por ter aceitado ser meu orientador de tcc, sou do fundo do meu coração muito grato ao senhor por toda paciência e disponibilidade que o senhor teve comigo. Professore Herbert o senhor foi o primeiro a me dar aula e, acredite ou não, mas foi o primeiro a não me incentivar a pular do barco da física nos momentos em que cogitei largar tudo, obrigado por tudo e desculpe por até hoje não ter pagado os 10 reais que o senhor me emprestou em 2016. Professor Wesley, muito obrigado, por todas as horas de conversas que tivemos, desde quando falamos de "Dark Souls" lá em 2016 até nossas últimas conversas em 2020, essas que me renderam algumas horas de consultas na psicóloga. Aos professores Lucas Chibebe, Ivo, Marcos Castro, Antônio Alonso, Luiz Gonzaga, Álvaro, Sílvio, Jonas e José Nicodemos, foi uma honra ter sido aluno de vocês, por todo o conhecimento que me foi ensinado e por todos os puxões de orelha que recebi. Como eu sempre digo, "obrigado por tudo e desculpa qualquer coisa".



*” Não sei o que faço  
A minha vida é uma luta sem fim  
Me sinto no espaço  
O tempo todo à procura de mim  
Há dias na vida  
Que a gente pensa que não vai conseguir  
Que é bem melhor deixar de tudo e fugir  
Que outro mundo tudo vai resolver  
Não sei o que faço  
Se volto agora ou continuo a seguir  
Eu sinto cansaço  
E já não sei se vale a pena insistir (...)”*

**– Paulo Sergio**

---

# RESUMO

---

Utilizando como base os conceitos da termodinâmica clássica objetivou-se encontrar expressões para a pressão e temperatura tomando como base um sistema quântico formado por uma partícula presa em um poço potencial unidimensional. De início é apresentado um apanhado histórico das máquinas térmicas, sua utilidade prática e como as mesmas evoluíram ao longo dos séculos. Em seguida a problemática é apresentada, o sistema e seus componentes são descritos e a equação que define seu estado energético é descrito. Utilizando as equações encontradas foram deduzidas relações que, para o poço potencial unidimensional infinito, são análogas aos conceitos de temperatura e pressão. Posteriormente são apresentados dois ciclos térmicos (ciclo de Carnot e o Ciclo de Stirling), as curvas que os formam é apresentada e seus processos são descritos com base nos conceitos estabelecidos no decorrer do trabalho. Os resultados obtidos foram satisfatórios pois além de apresentar concordância dimensional com o que foi a priori proposto a abordagem possibilitou uma expansão da teoria já bem fundamentada na literatura [1] ao introduzir duas expressões que são análogos quânticos a conceitos estabelecidos para sistemas clássicos.

**Palavras - chave:** Termodinâmica Quântica, Poço potencial, Processos térmicos.

---

# ABSTRACT

---

Using classical thermodynamics concepts as a basis, the objective was to find expressions for pressure and temperature, based on a quantum system composed of a particle trapped in a one-dimensional potential well.

Initially, a historical overview of thermal machines is presented, including their practical utility and how they have evolved over the centuries. Next, the issue is introduced, the system and its components are described, and the equation defining its energy state is presented. Using the derived equations, relationships were deduced that, for the infinite one-dimensional potential well, are analogous to the concepts of temperature and pressure.

Subsequently, two thermal cycles are presented (the Carnot cycle and the Otto cycle), and the curves that form them are described based on the concepts established throughout the work.

In conclusion, it can be stated that the obtained results were satisfactory, as they not only exhibit dimensional agreement with the initially proposed ideas but also expand the theory already well-founded in the literature [2] by introducing two expressions that serve as quantum analogs to concepts established for classical systems.

**Key - words:** Quantum Thermodynamics, Potential Well, Thermal Processes.

---

# SUMÁRIO

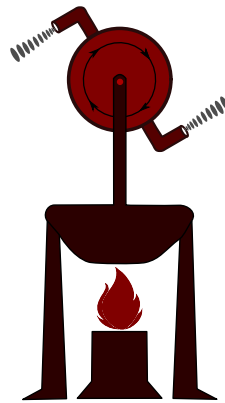
---

<b>Capítulo 1: Introdução</b>	<b>13</b>
<b>Capítulo 2: Energia de uma partícula em um poço potencial infinito</b>	<b>18</b>
2.0.1 Temperatura associado aos estados quânticos	19
2.0.2 Pressão associada aos estados quânticos	21
2.0.3 Equação geral dos gases para um sistema termodinâmico quântico	23
<b>Capítulo 3: Processos Termodinâmicos</b>	<b>25</b>
3.0.1 Processos Adiabáticos	25
3.0.2 Processos isobáricos	27
3.0.3 Processos isotérmicos	28
3.0.4 Processos Isocóricos	29
<b>Capítulo 4: Máquinas quânticas</b>	<b>30</b>
4.1 Ciclo termodinâmico quântico de Carnot	30
4.2 Ciclo termodinâmico quântico de Stirling	32
<b>Capítulo 5: Conclusões</b>	<b>34</b>

---

# INTRODUÇÃO

---



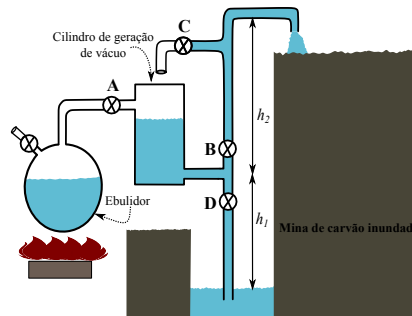
**Figura 1.1:** Desenho esquemático da Eolípila de Heron.

O desafio de se gerar movimento, por meio do calor, teve início ainda no século I, com os antigos gregos. O filósofo e matemático grego, Heron de Alexandria (10 d.C - 80 d.C), foi um dos precursores dessas iniciativas [3]. Uma das descrições mais famosas de Heron é a chamada Eolípila, veja figura 1.1, uma esfera oca que recebe vapor de um recipiente abaixo contendo água fervendo. Os dois canos diametralmente opostos expõem vapor d'água fazendo com que a esfera gire em seu eixo.

A primeira tentativa, bem sucedida, de substituição do trabalho humano ou animal por uma máquina foi realizado por Thomas Savery, em 1698. Devido às frequentes inundações em minas de carvão na Inglaterra, a retirada de água nas escavações era um trabalho realizado por bombas à vácuo parcial, seguindo o princípio da bomba de Galileu conhecida na época. Com o intuito de tornar o processo mecanizado, Thomas Savery desenvolveu uma máquina que gerava vácuo em um cilindro, por meio da queima de carvão, e assim poderia sugar água das minas, seguindo o esquema ilustrado na figura 1.2.

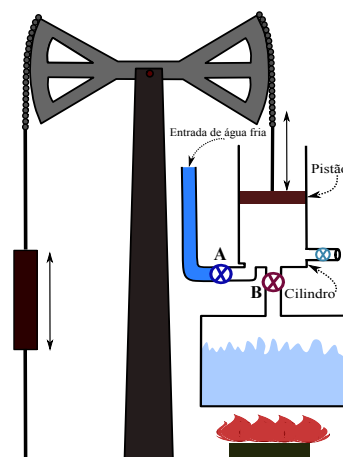
Na máquina de Savery, figura 1.2, inicialmente as válvulas A e B são abertas permitindo que vapor d'água adentre o cilindro empurrando água contida na altura  $h_2$ , enquanto as válvulas C e B permanecem fechadas. Em seguida a válvula C é aberta para

que o cilindro esfrie, mantendo as válvulas A e B fechadas. Desta forma é gerado um vácuo parcial e o registro D é aberto para que a água dentro da mina, à profundidade  $h_1$ , seja sugada para o cilindro e expulsa novamente seguindo o procedimento da primeira etapa. Com esse mecanismo se podia retirar água de uma mina até no máximo 10 m de profundidade da máquina, que é o limite para uma bomba de Galileu operar [1].



**Figura 1.2:** Máquina térmica de Thomas Savery usada para bombear águas das minas alagadas.

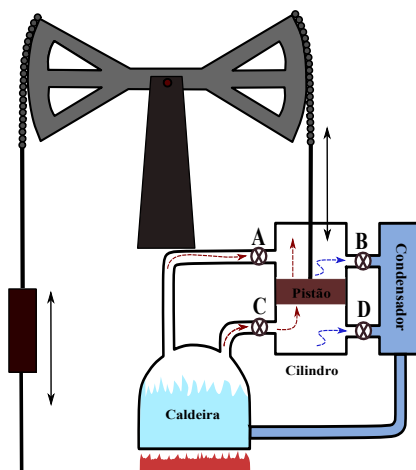
As dificuldades naturais, impostas à máquina de Savery, foram resolvidas em 1712 no projeto bem sucedido de Thomas Newcomen que desenvolveu a primeira máquina térmica a gerar trabalho contínuo, operando em ciclos. Neste projeto, como descrito na figura 1.3, vapor de água entra no cilindro, pela válvula B, empurrando o pistão para cima, ajudado pelo contrapeso que se movimenta em um cavalete, puxando o pistão. Quando o cilindro é completamente cheio, a válvula A é aberta e água fria é borrifada neste compartimento, criando vácuo parcial sugando o pistão de volta, empurrado pela pressão atmosférica. Com esse movimento o pistão traciona uma bomba hidráulica no final do cavalete, que puxa, mecanicamente, água da mina, sem a necessidade da sucção exigida nas máquinas Savery.



**Figura 1.3:** Máquina térmica de Thomas Newcomen.

Em 1764, o escocês James Watt tomou conhecimento do funcionamento das máquinas Newcomen examinando uma maquete. Watt percebeu um grande desperdício de energia nesse projeto, pois no funcionamento da máquina o cilindro era aquecido

com a introdução de vapor e em seguida resfriado gerando vácuo parcial, para iniciar um novo ciclo o cilindro deveria ser novamente aquecido evitando a condensação do vapor introduzido. Nesse processo, muito calor era desperdiçado aquecendo e resfriando o cilindro com o pistão. Para resolver essa ineficiência, Watt desenvolveu o conceito do Condensador, veja figura 1.4, um grande tanque para resfriar o vapor d'água para ser novamente aquecido na caldeira. No projeto de James Watt, não se utiliza o princípio de formação de vácuo parcial como nos motores Newcomen, como descrito na figura 1.4, em vez disso, na primeira etapa abrimos as chaves C e B, mantendo A e D fechadas fazendo com que o vapor realize trabalho empurrando o pistão. Em seguida as chaves A e D são abertas mantendo B e C fechadas fazendo com que o vapor empurre o pistão para sua posição inicial. Com isso o vapor sempre está movimentando o pistão para que este transmita movimento para ser utilizado em uma bomba d'água, ou outro mecanismo que poderia se beneficiar deste trabalho útil [3].



**Figura 1.4:** Esquema simplificado da máquina térmica de James Watt.

Historicamente a eficiência e potência das máquinas térmicas são propriedades primordiais no planejamento e concepção destes artefatos. Mesmo que do ponto de vista estrutural uma máquina térmica apresente inúmeras partes mecânicas como tubos, conexões, eixos móveis, válvulas, entre outros, observando teoricamente seu funcionamento, vemos que essas máquinas são dispositivo que convertem a energia que lhe é fornecida, através de um reservatório a alta temperatura ( $T_Q$ ), em trabalho mecânico ( $W$ ), sendo necessário rejeitar parte dessa energia a uma fontes frias de baixa temperatura ( $T_F$ ), para que um novo processo tenha início.

Apesar de ser um processo que a muitos anos vem sendo utilizados pelos engenheiros e entusiastas da área os processos que norteiam o funcionamento de uma máquina térmica ainda apresentam uma grande barreira a ser ultrapassada que é a sua eficiência. Ao longo dos anos de desenvolvimento as máquinas térmicas sempre apresentaram um altíssimo grau de desperdício de energia. Tomando como exemplo um equipamento presente em nosso dia a dia, o motor a combustão de um automóvel

movido a gasolina, a eficiência do mesmo permeia valores de 26% a 30%, isto é, de toda a energia "armazenada" em seu combustível cerca de 70% não é transformada em movimento [4]; é perdida através de som, calor e desgaste mecânico, apenas para citar alguns exemplos. Em contrapartida carros elétricos, cuja fonte de movimento não está baseada nos processos termodinâmicos, mas sim, em processos eletromagnéticos exibem uma eficiência de aproximadamente 90%.

no início do século XIX o engenheiro militar francês Nicolas Léonard Sadi Carnot, propôs um sistema teórico capaz de realizar trabalho e cuja eficiência é perfeita. A teoria foi desenvolvida com o objetivo de abordar a seguinte questão: Como tornar uma máquina térmica que opera em ciclos o mais eficiente possível?

Para que tal esquema seja transposto da teoria para a prática, deve-se tomar um pistão e fazer com que o mesmo opere entre um par de reservatórios, o primeiro tendo como função fornecer calor devido a sua elevada temperatura ( $T_H$ ) e o segundo reservatório, dotado de uma menor temperatura ( $T_C$ ), sendo responsável por receber o excesso de calor que foi transferido para o sistema.

Entretanto apesar da aparente simplicidade segundo Carnot, o rendimento máximo de uma máquina será sempre inferior a 100%, devido à limitação da quantidade de trabalho que ela pode realizar em comparação com a quantidade de calor que recebe.

O modelo teórico do motor proposto por Carnot é ideal, porém a sua construção e aplicação prática se mostra inviável devido aos seguintes fatores a seguir: I) Para que ocorra troca de calor de forma adequada o tempo necessário deveria ser infinito, sendo assim, analisando em termos de potência temos, a mesma seria nula. II) Devido as perdas inerentes do sistema para que o gás volte para a condição inicial, é necessária uma quantidade de energia superior àquela descrita pelo modelo de Carnot. Dessa forma a eficiência do motor já se torna reduzida e, a cada ciclo, a mesma apresenta uma maior porcentagem de deficit de energia.

No final do século XIX e início do século XX ocorreu uma das maiores revoluções científicas da história da humanidade.

O desenvolvimento da mecânica quântica foi motivado por uma série de observações e problemas experimentais que não podiam ser explicados pelas teorias físicas clássicas da época, como a mecânica newtoniana e a eletrodinâmica clássica (Lei de Coulomb e teoria eletromagnética de Maxwell). Dentre outros algumas das principais razões que levaram ao desenvolvimento da mecânica quântica incluem:

- Problemas na Física Clássica: A física clássica funcionava bem em muitas situações, mas começou a mostrar suas limitações em escalas microscópicas, altas velocidades e em interações de partículas subatômicas.
- Radiação de Corpo Negro: A falha das teorias clássicas em explicar o espectro de radiação de corpo negro foi um problema importante. As previsões da física clássica



não concordavam com as observações experimentais, e isso levou a busca por uma nova teoria que pudesse explicar esse fenômeno.

- **Efeito Fotoelétrico:** As observações do efeito fotoelétrico, em que elétrons são ejetados de um material quando exposto à luz, não podiam ser explicadas adequadamente pelas teorias clássicas da luz (teoria eletromagnética). A ideia de que a luz consiste de partículas discretas de energia (fótons), proposta por Einstein, foi uma das primeiras pistas para a necessidade de uma nova teoria.
- **Estabilidade dos Átomos:** A eletrodinâmica clássica não conseguia explicar por que os elétrons não deveriam perder energia continuamente enquanto orbitavam o núcleo, o que os faria colapsar nos núcleos. O modelo de Bohr para o átomo resolveu parte desse problema, mas ainda era uma solução semi-clássica e apresentava limitações.

Todas essas razões, entre outras, conduziram os físicos a buscar uma nova teoria que pudesse descrever adequadamente o comportamento das partículas em escalas microscópicas, levando ao desenvolvimento da mecânica quântica[5].

O trabalho proposto é segmentado da seguinte forma; no primeiro capítulo é exposto uma introdução histórica da termodinâmica e das máquinas térmicas e como as principais máquinas e conceitos evoluíram com o passar dos séculos. O segundo capítulo apresenta a base teórica do trabalho, nesta sessão é apresentado o sistema onde será feito o estudo e as equações deduzidas a partir das condições iniciais. No terceiro capítulo temos a apresentação dos processos termodinâmicos clássicos e de seus análogos. Em seguida, no quarto capítulo, são apresentados dois ciclos termodinâmicos (Carnot e Stirling) e, ademais, como suas etapas são descritas tomando-se como base a mecânica quântica.

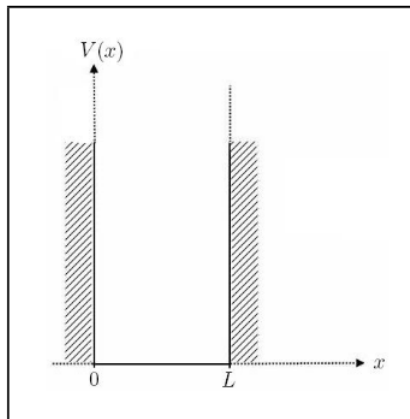
---

## ENERGIA DE UMA PARTÍCULA EM UM POÇO POTENCIAL INFINITO

---

Com o intuito de fazer a transposição de propriedades termodinâmicos para um sistema quântico, para tanto foi considerado como base o sistema quântico mais simples, o poço de potencial infinito. Inicialmente tomou-se uma partícula de massa  $m$ , confinada em um poço potencial unidimensional cuja largura vale  $L$ . Como ilustrado na figura 2.1, a função potencial,  $V(x)$ , desse poço é descrita como:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 < x < L \\ \infty, & \text{se } x \geq L \\ \infty, & \text{se } x \leq 0. \end{cases} \quad (2.1)$$



**Figura 2.1:** Representação de um poço de potencial infinito. Nesse potencial temos potencial infinito fora do intervalo  $[0 : L]$  e zero para as regiões fora do poço.

Para a função 2.1, no intervalo  $[0, L]$ , a equação de Schrodinger independente do tempo pode ser escrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.2)$$

onde de início temos definido que

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

o que, ao isolar o termo  $E$  e, em seguida, substituir na equação 2.2, chegamos a conclusão que:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad (2.3)$$

A solução geral da equação diferencial acima (Eq. 2.3) é a função de onda  $\psi(x)$  [5] da partícula dentro da caixa que, de forma geral pode ser escrita da forma:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (2.4)$$

Para que a mesma apresente continuidade é necessário que sejam satisfeitas as condições de fronteira, ou seja, é exigido que  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ . O resultado de tal imposição é que espera-se que a partícula apresente movimento apenas no interior da região de interesse, sendo impossível que a partícula apresente movimento fora do intervalo  $[0, L]$ . Utilizando tais condições de fronteira obtemos que  $A \neq 0$ ,  $B = 0$  e  $k = n\pi/L$ , onde  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Com a quantização imposta para a constante  $k$  temos que a energia do sistema também é quantizada e também depende do comprimento  $L$  do sistema [2], de tal forma que a energia em função do comprimento  $L$  e do número de ondas  $n$  é matematicamente definido como sendo:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad (2.5)$$

Impondo que a função de onda de um sistema quântico deve ser normalizada em todo o espaço de domínio dessa função[6], podemos determinar a constante  $A$  fazendo

$$\int_0^L |\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_0^L dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = 1 \Rightarrow |A|^2 = \frac{2}{L} \quad (2.6)$$

Uma vez obtido o valor da constante  $A$  encontramos que as funções de onda que descrevem o comportamento da partícula, são descritas pela equação:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \quad (2.7)$$

### 2.0.1 Temperatura associado aos estados quânticos

Utilizando como fundamento os conceitos clássicos da termodinâmica [7] e tendo como objetivo encontrar um análogo quântico para a função de estado temperatura iniciamos esta sessão tomando como sistema de estudo um gás ideal constituído por  $N$

moléculas monoatômicas de massa  $m$ , confinados em uma caixa de lados, bem definidos, de comprimento  $L$ , volume  $V = L^3$ , pressão  $p$  e temperatura  $T$ .

No sistema em questão vamos considerar que uma das paredes do poço potencial tem a capacidade de se movimentar ao longo de seu comprimento, tornando-o um análogo, em escala quântica, de um pistão unidimensional, assim lhe é atribuído a função de definir o volume do sistema termodinâmico quântico.

$$L \Leftrightarrow V \quad (2.8)$$

Desta forma, quaisquer que forem as variações infinitesimais no comprimento  $L$  haverá variações no valor da energia  $(E_n)$ , auto-função  $(\psi)$  e auto-estados  $(\phi(x))$ . Como consequência direta de tais mudanças a Hamiltoniana do sistema

$$E(L) = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (2.9)$$

também sofre uma mudança infinitesimal em seu valor. Pela teoria clássica [8] temos que o número de mols é definido como sendo:

$$n = N/N_A \quad (2.10)$$

onde  $N_A = 6,02 \times 10^{23}$  moléculas/mol, conhecido como número de Avogadro.

O macroestado desse sistema é bem definido pelas variáveis  $(p, V, T)$  e a energia total desse sistema [7], seguindo o princípio da equipartição de energia e considerando 3 graus de liberdade translacionais é definida matematicamente pela equação 2.11.

$$E = \frac{3}{2}nRT. \quad (2.11)$$

Para apenas um grau de liberdade translacional,  $L$ , a energia por molécula é matematicamente descrita por:

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{2}k_B T, \quad (2.12)$$

sendo  $k_B = 1,38 \times 10^{-23} J/K$  a já bem estabelecida na literatura constante de Boltzmann. Na Eq. (2.5), temos a energia por partícula em relação a cada estado quântico, considerando um grau de liberdade. Na Eq. (2.12) encontramos também a energia por partícula considerando também um grau de liberdade,  $L$ . Como ambas as equações são representações da energia da partícula em questão, podemos facilmente igualar ambas e assim obter a seguinte expressão:

$$\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{1}{2}k_B T. \quad (2.13)$$

Dessa igualdade podemos encontrar uma grandeza que identificamos como a temperatura associada a cada estado quântico do poço de potencial:

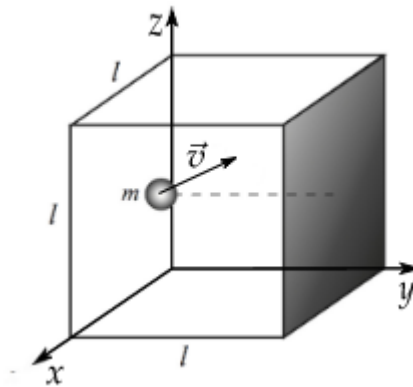
$$T = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{k_B m L^2} \quad (2.14)$$

Como é feito no modelo cinético molecular, realizamos a análise do comportamento de uma partícula e estendemos esses resultados para  $N$  partículas, com o intuito de encontrar as grandezas pressão e temperatura, que são quantidades que somente fazem sentido para um coletivo de partículas. No caso do poço de potencial, podemos ampliar nossa análise para  $N$  partículas, uma vez encontrado a energia por partícula. Desta forma, a Eq.(2.14) é interpretada como a temperatura, por nível energético  $E_n$ , de um coletivo de  $N$  partículas, sendo que cada uma está submetida ao perfil de potencial do poço infinito.

A equação 2.14 é de grande importância pois a mesma além de ser um equação nova em relação ao que foi apresentado na bibliografia a mesma indica que o que foi concebido como sendo a temperatura da partícula depende exclusivamente do nível energético da partícula e do comprimento do sistema em que a mesma está contida.

## 2.0.2 Pressão associada aos estados quânticos

A pressão que um gás exerce sobre o recipiente onde está contido pode ser definida como sendo a média temporal da transferência de momento linear das moléculas que compõe o gás para a parede o sistema. A figura 2.2 representa o caso idealizado onde existe apenas uma única molécula presente em uma caixa de dimensões  $l$ .



**Figura 2.2:** Esquema representando uma caixa em 3 dimensões contendo uma única molécula

Inicialmente foi considerado que a molécula presente na caixa está em constante movimento e se choca com as paredes do recipiente, o momento associado a essa partícula antes e depois da colisão [9] pode ser escrita como sendo:

$$\Delta p_{i,x} = -mv_{i,x} - mv_{i,x} = -2mv_{i,x} \quad (2.15)$$

Agora, levando-se em consideração que a partícula se encontra no ponto de origem do sistema de coordenadas, e assumindo, também, que o tempo necessário para que ela se

choque com a parede do recipiente e volte para a posição de origem é  $\Delta t = \frac{2l}{v_{i,x}}$  temos que a força que essa partícula exerce sobre a parede da caixa é matematicamente dada por

$$F_{i,x} = \frac{mv_{i,x}^2}{l} \quad (2.16)$$

Partindo do caso idealizado podemos generalizar e assumir que, ao invés de existir uma única partícula dentro da caixa, existem  $N$  moléculas distribuídas em  $n$  mols. Fazendo as devidas correções matemáticas concluímos que a pressão exercida sobre uma das faces da figura 2.2, devido as  $N$  moléculas, pode ser reescrita como sendo:

$$p = \sum_{i=1}^N \frac{F_{i,x}}{l^2} = \frac{nm}{V} \bar{v}_x^2 \quad (2.17)$$

Onde, consideramos  $n$  como sendo o número de mols do gás,  $m$  a sua massa,  $N_A$  o número de Avogrado e  $\bar{v}_x^2 = \frac{\bar{v}^2}{3}$  a velocidade de deslocamento de cada ente constituinte do gás. É possível ainda reescrever a relação da seguinte forma

$$p = \frac{nM}{3V} \bar{v}^2 \quad (2.18)$$

A partir dessa introdução, a pressão de um gás em um modelo clássico, podemos extrapolar o conceito para o sistema composto de uma única partícula em um poço potencial unidimensional. Para tanto, levando-se em consideração que estamos lidando com uma partícula cujo movimento está restrito a apenas uma única dimensão a ela podemos relacionar a energia cinética e, pelo teorema da equipartição da energia de uma molécula em um gás, e energia  $E = \frac{1}{2}k_B T$ , dessa forma ficamos com:

$$\frac{1}{2}m\bar{v}^2 = \frac{1}{2}k_B T \quad (2.19)$$

Com um simples rearranjo dos termos e, substituindo do termo  $\bar{v}^2$  na equação da pressão 2.17, encontramos que para um gás clássico a pressão pode ser escrita da seguinte forma:

$$p = \frac{nN_A k_B T}{L} \quad (2.20)$$

Substituindo, nesta expressão, a já dada, expressão da temperatura 2.14 chegamos, por fim, a uma expressão que representa a pressão devido ao coletivo de partículas presente no estado energético  $n$  e restritas ao poço unidimensional de comprimento  $L$ :

$$p_n = \frac{Nn^2\pi^2\hbar^2}{L^3m} \quad (2.21)$$

A equação acima encontrada foi deduzida utilizando processos termodinâmicos, o mesmo resultado foi deduzido nas referências [2, 10, 11, 12] utilizando-se de princípios da mecânica quântica.

### 2.0.3 Equação geral dos gases para um sistema termodinâmico quântico

Para um sistema termodinâmico clássico temos que a equação geral dos gases, também conhecida como "Equação do Gás Ideal" ou "Equação de Estado dos Gases Ideais", é uma equação cuja aproximação é válida em condições em que as partículas do gás estão suficientemente distantes umas das outras e onde as interações entre elas são consideradas insignificantes. A equação relaciona as variáveis de pressão ( $p$ ), volume ( $V$ ), temperatura ( $T$ ) e quantidade de substância ou número de mols ( $n$ ) para um gás ideal. Esta equação pode ser definida como sendo.

$$pV = nRT \quad (2.22)$$

$p$  é a pressão do gás (geralmente em pascal, Pa, em unidades do Sistema Internacional);  $V$  é o volume ocupado pelo gás (geralmente em metros cúbicos,  $m^3$ );  $n$  é a quantidade de substância, que é medida em moles (mol);  $R$  é a constante dos gases ideais, que é a mesma para todos os gases e tem um valor aproximado de  $8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$  (joules por mol por kelvin);  $T$  é a temperatura absoluta do gás, medida em kelvin (K) [7].

Essa equação é uma representação simplificada do comportamento dos gases em condições ideais, onde as interações entre as moléculas do gás são negligenciadas e o volume das moléculas individuais é considerado desprezível em relação ao volume total ocupado pelo gás. Em condições próximas às reais, o comportamento dos gases pode desviar-se dessa equação, especialmente em altas pressões ou baixas temperaturas, quando as interações entre as moléculas se tornam mais significativas. Esta equação é válida apenas quando trata-se de sistemas clássicos, uma vez considerados efeitos quânticos sua validade é perdida.

Com base com o que foi até o momento demonstrado a cerca da pressão e temperatura é possível demonstrar uma equação geral de um gás quântico, estando o mesmo preso a uma única dimensão, para tanto tomando como base as equações 2.21 e 2.14 é possível, igualando e substituindo os termos pertinentes, desenvolver a seguinte relação:

$$T = \frac{1}{k_B} \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{mL^3} L = \frac{pL}{k_B} \quad (2.23)$$

ou ainda

$$\frac{pL}{T} = k_B \quad (2.24)$$

Na equação 2.24 o termo  $k_B$  representa a constante de Boltzmann, cujo valor é  $1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ . Os termos  $p$ ,  $L$  e  $T$  representam a pressão, comprimento e temperatura associada aos estados quânticos respectivamente. Realizando a análise dimensional dos termos temos que a pressão apresenta unidade de Newton, o comprimento tem sua unidade em metros e a temperatura, assim como seu análogo clássico, apresenta unidade em Kelvin. Apesar

de apresentar a mesma unidade de seu análogo clássico vale ressaltar que a temperatura neste caso não tem o mesmo sentido, isto é, a temperatura neste caso não é a temperatura de um estado termodinâmico em equilíbrio e sim, a representação da temperatura efetiva associada a cada estado quântico derivada dos autovalores de energia destes estados. É importante notar a semelhança entre a equação aqui deduzida que relaciona as variáveis termodinâmicas em um poço potencial unidimensional e a mesma equação para o gás ideal clássico (equação [2.22](#)).



---

# PROCESSOS TERMODINÂMICOS

---

## 3.0.1 Processos Adiabáticos

Utilizando como base a teoria da termodinâmica clássica, é possível interpretar os processos adiabáticos como sendo tais que não ocorrem a transferência de calor ou massa entre o sistema, que está termicamente isolado, e seus arredores. Neste tipo de processo um pistão em uma máquina tem a possibilidade de se movimentar pois uma característica do processo é que apenas a energia na forma de trabalho é capaz de ser trocado.

Considerando o sistema quântico inicialmente proposto podemos fazer uma analogia com a termodinâmica clássica onde, as paredes do poço potencial infinito podem ser vistas como pistões, unidimensionais, isto é, as paredes tem a capacidade de se movimentar ao longo de seu eixo, e o gás presente na teoria clássica é, neste caso, uma única partícula monoatômica.

Inicialmente o estado de uma partícula em um poço potencial infinito pode ser descrito como sendo combinação de seus auto-estados.

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) \quad (3.1)$$

Como dito anteriormente o sistema em estudo tem a capacidade de movimentação de suas fronteiras, dessa forma, uma vez que o sistema permanece fora de equilíbrio estático os termos  $|a_n|$  tem seu valor absoluto mantidos constantes. Com isso esperamos que não ocorra nenhuma transição de estados energéticos da partícula durante o processo adiabático. Fazendo uma rápida análise das equações já apresentadas é possível observar que conforme o comprimento  $L$  do sistema sofre uma alteração, os auto-estados  $\phi$  e, consequentemente, seus autovalores  $E_n$  também sofrem alterações.

Admitindo que o comprimento do sistema ( $L$ ) cresce, o valor esperado da Hamiltoniana do sistema é:

$$E = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E(n), \quad (3.2)$$

tomando como base a equação acima e aplicando uma diferencial em relação a  $n$ , chegamos a seguinte equação:

$$\Delta E = \sum_{i=1}^{\infty} \underbrace{(\Delta |a_n|^2) E_n}_Q + \sum_{i=1}^{\infty} \underbrace{|a_n|^2 \Delta E_n}_W \quad (3.3)$$

Analisando a equação 3.3 é possível identificar o calor no processo de variação  $\Delta E$  como sendo:

$$Q = \sum \Delta (a_n)^2 E_n \quad (3.4)$$

Assumindo um ganho de energia do sistema temos que, uma vez que a única possível variação da energia ocorre através do termo que representa o calor, obrigatoriamente que  $\Delta |a_n|^2 \neq 0$ . É possível ainda concluir que sendo  $Q = 0$  os termos  $\Delta |a_n|^2 = 0$  ou ainda que  $\Delta |a_n| = 0$ , esta última indicando que os módulos dos coeficientes da expansão permanece constantes.

Voltando, novamente, nossa atenção para os processos clássicos da termodinâmica é necessário ter em mente que, a partir da primeira lei da termodinâmica temos que para o processo adiabático a relação existente entre a pressão e o volume é a seguinte [2]

$$pV^\gamma = \text{constante} \quad (3.5)$$

Onde o termo  $\gamma$  é definido como sendo a razão entre  $C_p$  e  $C_V$ , sendo os mesmos os calores específicos quando pressão e volume são mantidos a um valor constante. A dedução da equação está incluída no anexo do trabalho.

Extrapolando o sistema para o caso unidimensional, e assumindo, novamente, que o volume  $V$  é agora definido pelo comprimento  $L$  do sistema temos que a seguinte relação  $pV^3 = \text{constante}$   $V \rightarrow 1$  nos leva a seguinte equação

$$p = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{mL^3} \quad (3.6)$$

A equação acima, diferente da equação 2.19 foi encontrada para apenas uma única partícula. Rearranjando os termos ficamos, por fim, com

$$pL^3 = n^2 \pi^2 \hbar^2 \rightarrow \text{cte} \quad (3.7)$$

A equação 3.7 representa o processo adiabático no poço potencial unidimensional.

De forma semelhante ao que ocorre no gás ideal é possível, em nosso sistema, ser feito um diagrama que relaciona a temperatura e o volume no processo adiabático, tal relação pode ser encontrada de acordo com se segue

$$\frac{pV}{T} = NR \quad (3.8)$$

$$pV^\gamma = p_0V_0^\gamma \rightarrow \textit{constante} \quad (3.9)$$

Tendo em mente que inicialmente temos

$$P = \frac{NRT}{V} \quad (3.10)$$

Ao substituir a equação 3.10 em 3.9 encontra-se

$$\frac{NRT}{V}V^\gamma = \frac{NRT_0}{V_0}V_0^\gamma \quad (3.11)$$

Rearranjando os termos chegamos a equação:

$$TV^{\gamma-1} = T_0V_0^{\gamma-1} = \textit{constante} \quad (3.12)$$

Para o sistema unidimensional da partícula no poço temos:

$$pL^3 = n^2\pi^2\hbar^2 \quad (3.13)$$

Onde, inicialmente, temos a seguinte relação

$$\frac{pL}{T} = k_B \Rightarrow p = \frac{k_B T}{L} \quad (3.14)$$

Substituindo a ultima expressão na equação antecessora chegamos por fim a relação

$$TL^2 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{k_B} \quad (3.15)$$

Na equação acima é importante ressaltar que o termo 2 que acompanha o comprimento  $L$  está representando o fator  $\gamma - 1$

### 3.0.2 Processos isobáricos

À luz dos conceitos clássicos da termodinâmica temos que um processo isobárico é uma transformação termodinâmica que ocorrem em um sistema mantido a pressão constante. Nesse tipo de processo, a pressão do sistema não varia, permitindo que outras grandezas, como volume e temperatura, possam mudar livremente em resposta às trocas de calor e trabalho realizadas pelo sistema [2].

Em nosso sistema de referência temos portanto que:

$$p = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{mL^3} = \textit{constante} \quad (3.16)$$

No processo de aquisição de energia o termo  $n^2$  cresce na mesma proporção que  $L^3$  também aumenta, caso semelhante ao do gás ideal.

Quando  $Q \rightarrow cp$  o calor entra com a realização de trabalho e também a temperatura aumentando.

Quando transportamos o sistema do modelo tridimensional para o modelo unidimensional temos a seguinte razão:

$$\frac{L}{T} = \text{constante} \quad (3.17)$$

### 3.0.3 Processos isotérmicos

Para um gás ideal que realiza um processo isotérmico, sabemos que o produto pressão-volume é uma constante. Denotando esta constante por  $C$ , temos

$$PV = C \quad (3.18)$$

No caso em questão, sabemos que a energia interna é somente uma função da temperatura. Assim, um processo à temperatura constante também é um processo à energia constante. Para nosso processo isotérmico quântico, o valor médio da energia será mantido constante. Neste processo, será permitido que a parede do poço em  $x = L$  possa se movimentar. Por meio dos resultados obtidos na seção anterior vemos que à medida que a parede do poço se move, a energia varia; pois a energia média é uma função de  $L$  e cai com o inverso do quadrado da largura do poço, isto é [2] [10]:

$$E(L) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2} \quad (3.19)$$

Já que, por definição, no processo isotérmico a energia média deve ser constante devemos fornecer energia para a partícula quântica – a substância de trabalho - de modo a manter o produto  $\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n$  constante. Esse tipo de energia necessária para manter a energia média constante vem de uma fonte externa e varia unicamente o termo  $a_n$ .

Em um gráfico que representa a relação entre pressão e volume (p-V), o processo isotérmico é identificado por uma curva distinta conhecida como isoterma, a qual se manifesta como uma linha horizontal. Durante esse tipo de transformação termodinâmica, a pressão e o volume do sistema variam, porém, como mencionado, o produto entre pressão e volume mantém-se constante.

Para o sistema em questão temos que

$$T = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{k_B m L^2} \quad (3.20)$$

Analisando a equação acima e tendo em mente a definição de processo isotérmico temos

que com a absorção de calor no sistema os termos obedecem a seguinte ordem

$$\frac{n^2}{L^2} \rightarrow \text{constante} \quad (3.21)$$

pois conforme  $n$  sofre variações temos proporcionalmente a mesma variação para o comprimento  $L$ . Assim, podemos inferir que o produto do análogo da pressão e do comprimento é constante, isto é,

$$pL = \text{constante} \quad (3.22)$$

### 3.0.4 Processos Isocóricos

O processo isocórico, também conhecido como processo isovolumétrico, é uma transformação termodinâmica que ocorre a volume constante, isto é  $L \rightarrow \text{constante}$ . Nesse processo, o sistema não realiza trabalho mecânico ( $W = 0$ ) nem há mudança no volume, pois ele é mantido fixo [7]. A energia transferida para o sistema é somente na forma de calor, e a temperatura do sistema pode variar. No gráfico de pressão versus temperatura ( $p - T$ ), o processo isocórico é representado por uma linha vertical, pois a pressão pode variar, mas o volume permanece inalterado. Assim sendo, para este processo temos que

$$\frac{p}{T} = \text{constante} \quad (3.23)$$

---

## MÁQUINAS QUÂNTICAS

---

### 4.1 Ciclo termodinâmico quântico de Carnot

O ciclo quântico de Carnot é um conceito teórico que descreve um processo ideal de conversão de calor em trabalho usando sistemas quânticos. Assim como o ciclo de Carnot clássico, ele envolve quatro etapas, mas em vez de lidar com sistemas macroscópicos, ele se aplica a sistemas quânticos, como partículas em estados ligados, como átomos ou moléculas. Observando a figura 4.2 abaixo podemos identificar 4 diferentes processos [2].

- Processo  $a \rightarrow b$

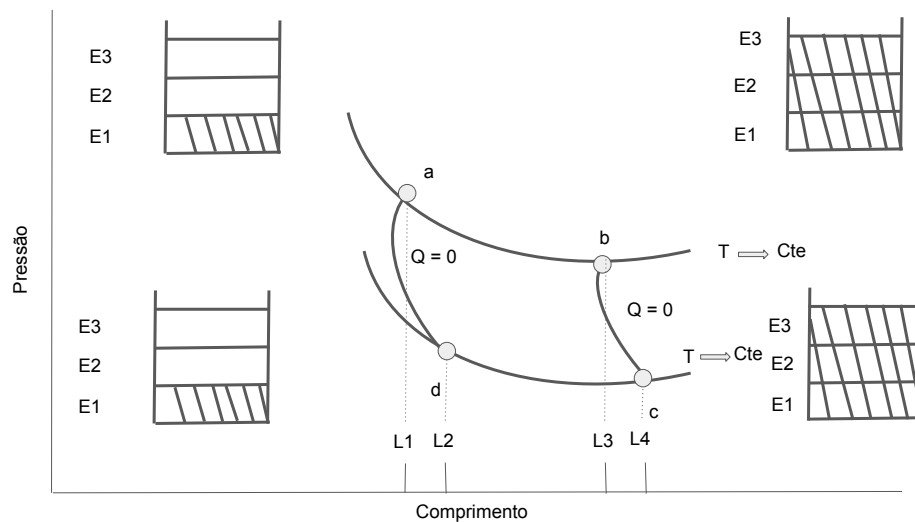
O processo definido pelo segmento que liga os pontos em questão ocorre devido ao contato com um reservatório térmico frio (Fonte Fria) mantido a uma temperatura constante. O sistema quântico absorve calor do reservatório, permitindo que ele se expanda e realize trabalho em alguma forma. Durante toda essa expansão, o sistema mantém sua temperatura constante, ou seja, ocorre uma troca de calor isotérmica.

A Expansão Isotérmica também pode ser pensada da seguinte maneira, Inicialmente, o poço de potencial tem uma largura  $L_1$  e a partícula quântica está no estado fundamental  $n = 1$  correspondente ao valor inicial de  $L$ . À medida que o poço expande, o estado  $n = 2$ , primeiro estado excitado, deve ser excitado. Isto deve ser feito fornecendo energia ao sistema, de modo a manter a energia média constante, já  $E_1$  diminui com a expansão do poço.

Caso, o poço continuasse expandindo, teríamos de continuar fornecendo energia ao átomo e excitar o próximo nível,  $n = 3$ , para a manter a energia constante.

- Processo  $b \rightarrow c$

Neste processo temos uma expansão adiabática. Nesta etapa, o sistema quântico é isolado termicamente, o que significa que não há troca de calor com o ambiente



**Figura 4.1:** Ciclo termodinâmico quântico de Carnot

externo ( $Q = 0$ ). O sistema continua a expandir, realizando trabalho enquanto sua temperatura diminui. Devido à característica adiabática do processo, a energia interna do sistema também diminui.

Neste processo, a partícula quântica mantém seu respectivo auto-estado, ou seja, um átomo, representado no diagrama no segundo estado excitado permanecerá durante toda a expansão neste estado. Uma maneira de tentarmos compreender essa afirmação é pensar que nesse caso só há trabalho sendo realizado, isto é, os níveis de energia mudam, pois o poço se expande. Entretanto, os níveis de ocupação ( $a_n$ ) são mantidos constantes, pois nenhuma energia externa (calor) é fornecida à partícula quântica. A essa interação que afeta a ocupação dos níveis de energia chamamos de calor.

- Processo  $c \rightarrow d$ .

Em seguida tem-se o processo que ocorre entre os pontos "c" e "d" e que representa a compressão isotérmica. Agora, o sistema quântico é colocado em contato com um reservatório térmico quente (Fonte Fria) mantido a uma temperatura constante, maior que a temperatura do reservatório frio. O sistema quântico libera calor para o reservatório, permitindo que ocorra a realização do trabalho sobre o sistema. A temperatura do sistema é mantida constante durante todo o processo, garantindo que ele permaneça em equilíbrio térmico com o reservatório quente.

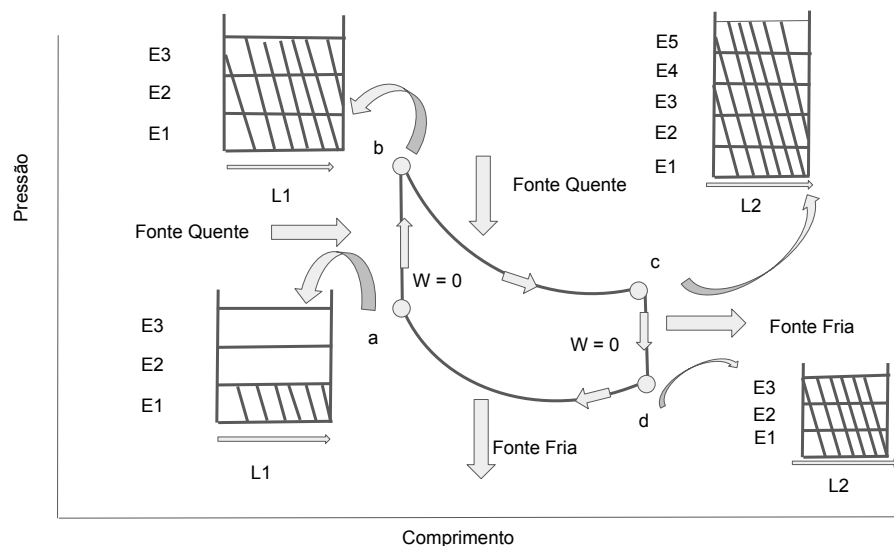
Agora, o processo ocorre de forma inversa a compressão adiabática. A largura do poço diminui, e a energia média tende a aumentar, logo, para impedir que isto ocorra, devemos retirar energia do sistema. De modo análogo ao caso da expansão isotérmica, há um limite para a compressão e neste caso procuramos um valor mínimo.

- Processo  $d \rightarrow a$ .

Nesta última etapa (compressão adiabática, o sistema quântico é novamente isolado termicamente ( $Q = 0$ ), e ele é comprimido ainda mais. O processo de compressão aumenta a energia interna do sistema, mas como não há troca de calor, a temperatura do sistema aumenta significativamente.

O ciclo quântico de Carnot é uma idealização teórica que demonstra como um sistema quântico poderia teoricamente realizar trabalho a partir da troca de calor entre dois reservatórios térmicos a diferentes temperaturas. Ele também serve para ressaltar que a eficiência de um ciclo quântico de Carnot depende das temperaturas dos reservatórios térmicos envolvidos, seguindo o mesmo princípio da eficiência do ciclo de Carnot clássico.

## 4.2 Ciclo termodinâmico quântico de Stirling



**Figura 4.2:** Ciclo termodinâmico quântico de Stirling

- Processo  $a \rightarrow b$

O processo definido entre os pontos  $a$  e  $b$  é denominada expansão isovolumétrica. Neste processo o sistema é aquecido a uma temperatura constante, enquanto sua pressão aumenta. O volume do sistema permanece constante dessa forma não há trabalho sendo realizado ( $W = 0$ ).

Uma vez que o sistema absorveu energia da fonte quente ocorre um aumento da energia da partícula presa no sistema. Como pode ser visto no gráfico e na equação 3.20 uma vez que a temperatura do sistema aumenta o auto-estado também é acrescido.



- Processo  $b \rightarrow c$

O processo que ocorre entre esses pontos é denominado expansão isotérmica, nela o sistema que está em contato com a fonte quente, tem o seu volume aumentado o que promove a realização de trabalho pelo sistema ( $W \neq 0$ ). Analisando o processo descrito anteriormente temos que uma vez que a temperatura é mantida constante a energia interna do sistema é uma função apenas da temperatura, dessa forma a energia interna da partícula no sistema é mantida constante apenas quando existe uma variação dos termos  $a_n$ . No gráfico essa variação é representada pelo aumento do primeiro nível energético para o terceiro nível.

- Processo  $c \rightarrow d$

A compressão isovolumétrica é o processo que ocorre entre os pontos "c" e "d". Esta etapa, que é oposta a o processo "a"  $\rightarrow$  "b" é caracterizado pela diminuição da temperatura do sistema decorrente da perda de calor para a fonte fria e, devido a não alteração do volume, da também não ocorre trabalho ( $W = 0$ ). Uma vez que o comprimento não é alterado e que a temperatura sofre um decréscimo, através da equação 3.20 o nível energético é obrigatoriamente reduzido para que seja respeitado o princípio fundamental do processo isocórico ( $\frac{p}{T} = \text{constante}$ ).

- Processo  $d \rightarrow a$

A compressão isotérmica é o processo representado entre os pontos "d" e "a". Esta etapa, pode ser entendida como sendo o processo inverso do que ocorre entre os pontos "b" e "c". O sistema é colocado em contato com a fonte fria e seu comprimento é reduzido o que de acordo com as equação da temperatura 3.20 implica em uma redução do nível energético da partícula.

---

## CONCLUSÕES

---

Como foi abordado inicialmente a história da termodinâmica remonta aos antigos gregos e desde então a mesma vem século a século sendo alvo de estudos e novas abordagens, passando ao longo do tempo de de uma escala macroscópica (com as máquinas térmicas de Héron e Thomas Newcomen, por exemplo) para uma escala de proporções ínfimas, milhares e até milhões de vezes a fração do metro.

Tendo em vista o horizonte deste trabalho foi possível traçar um paralelo entre as características termodinâmicas de um sistema macroscópico (composto por um gás monoatômico e um reservatório) e o sistema composto por uma partícula em um poço potencial infinito.

Utilizando os conceitos da termodinâmica clássica e da mecânica quântica foi possível encontrar análogos quânticos para a temperatura e pressão de uma única partícula. A validade desses termos foi conferida a partir da análise dimensional dos mesmos.

Apesar da estranheza em relação a aplicação de termos voltados para um conjunto de partículas para uma única partícula deve-se lembrar que há uma diferença na aplicação dos conceitos. No caso em estudo o que foi encontrado foram análogos matemáticos baseados nos níveis energéticos da partícula presa no poço.

A partir da equação clássica que descreve as características gerais de um gás monoatômico foram aplicadas os análogos da Temperatura e Pressão deduzidos, desta forma foi encontrada uma equação que descreve o comportamento de uma partícula retida em um sistema unidimensional em termos do comprimento do sistema, temperatura, pressão. É necessário perceber que da mesma forma que na equação clássica existe uma relação entre os termos da equação e a constante de Boltzmann. Tal equação demonstrou-se análoga a equação para um gás clássico.

Os processos termodinâmicos relacionados aos ciclos de Carnot e de Stirling foram analisados à luz da mecânica quântica e das equações da Pressão e da Temperatura anteriormente derivadas. Dessa forma foi possível analisar os processos que ocorrem nos

dois ciclos não utilizando como base um coletivo de partículas, mas apenas a nossa única partícula em estudo.

---

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

- [1] QUADROS, S. **A termodinâmica e a invenção das máquinas térmicas**. [S.l.]: Editora Scipione, 1996.
- [2] BENDER, C. M.; BRODY, D. C.; MEISTER, B. K. Quantum mechanical carnot engine. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 33, n. 24, p. 4427, 2000.
- [3] REZENDE, N. R. História e filosofia da ciência e natureza da ciência: Uma proposta de inserção da temática no ensino médio utilizando as leis da termodinâmica. 2021.
- [4] ALBATAYNEH, A. et al. Comparison of the overall energy efficiency for internal combustion engine vehicles and electric vehicles. **Rīgas Tehniskās Universitātes Zinātniskie Raksti**, Riga Technical University, v. 24, n. 1, p. 669–680, 2020.
- [5] EISBERG, R.; RESNICK, R. **Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles**. [S.l.: s.n.], 1985.
- [6] GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. **Introduction to quantum mechanics**. [S.l.]: Cambridge university press, 2018.
- [7] CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics**. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 1998.
- [8] HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; KRANE, K. S. **Physics, Volume 2**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2010.
- [9] HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. **Fundamentals of Physics, Volume 1**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2017.
- [10] BENDER, C. M.; BRODY, D. C.; MEISTER, B. K. Entropy and temperature of a quantum carnot engine. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 458, n. 2022, p. 1519–1526, 2002.
- [11] SUTANTYO, T. E. P. Three-state quantum heat engine based on carnot cycle. **Jurnal Fisika Unand**, v. 9, n. 1, p. 142–149, 2020.
- [12] DAS, C.; BERA, N.; BHATTACHARYYA, K. Graham's law of diffusion: Quantum analogy and non-ideality. **Journal of Chemical Sciences**, Springer, v. 121, p. 607–615, 2009.

---

## ANEXOS

---

### 6.0.1 Análises dimensionais

- Para a expressão da temperatura 2.14 a seguinte análise dimensional é feita.

$$\boxed{T} = \frac{\boxed{\hbar^2}}{\boxed{m} \boxed{k_B} \boxed{L^2}} \quad (6.1)$$

$$= \frac{J^2 S^2}{K_g \frac{J}{K} m^2} = \frac{Nm s^2 K}{K_g m^2} \quad (6.2)$$

$$= \frac{NK}{K_g \left(\frac{m}{s^2}\right)} = \frac{NK}{N} = K \quad (6.3)$$

A partir da análise acima é possível notar que a relação deduzida neste trabalho para o análogo da temperatura para uma partícula presa em um poço potencial unidimensional tem, de fato, a mesma dimensão de temperatura (Kelvin) que a utilizada nos modelos clássicos.

- Para a expressão da temperatura 2.21 a seguinte análise dimensional é feita.

$$\boxed{p} = \frac{\boxed{\hbar^2}}{\boxed{m} \boxed{L^3}} \quad (6.4)$$

$$= \frac{J^2 S^2}{k_g m^3} = \frac{N^2 m^2 s^2}{k_g m^3} \quad (6.5)$$

$$= \frac{N}{K_g \left(\frac{m}{s^2}\right)} N = N \quad (6.6)$$

Com a análise dimensional apresentada acima pode-se notar que o análogo da pressão de uma partícula em nosso sistema tem, de fato, dimensão de força ( $\frac{N}{m^2}$ ) assim como no caso clássico.

## 6.0.2 Dedução da equação para o processo adiabático

A partir da primeira Lei da Termodinâmica temos que

$$dQ = dU + dW \quad (6.7)$$

Para o processo adiabático tem-se que  $dQ = 0$

$$0 = dU + dW \quad (6.8)$$

$$dU + dW = 0 = dU + PdV \quad (6.9)$$

$$dU + dW = 0 = dU + PdV \quad (6.10)$$

Sabendo que a energia interna interna pode ser definida como sendo

$$dU = nC_v dT \quad (6.11)$$

e, que para um gás ideal, podemos definir a seguinte relação

$$PV = nRT \quad (6.12)$$

Pode-se inferir a seguinte relação a partir da equação anterior

$$dT = \frac{PdV + VdP}{nR} \quad (6.13)$$

Substituindo a equação acima na equação na equação 6.11 tem-se

$$dU = \frac{C_v}{R}(PdV + VdP) \quad (6.14)$$

Substituindo a equação acima na equação 6.9 pode-se chegar a

$$\frac{dP}{P} = \frac{dV}{V} \frac{C_v + R}{C_v} \quad (6.15)$$

ou ainda

$$\frac{dP}{P} = -\frac{dV}{V} \gamma \quad (6.16)$$

sendo que  $\gamma = \frac{C_p}{C_v} = \frac{C_v + R}{C_v}$

A partir da equação 6.16 tem-se que

$$\int \frac{C_p}{C_v} = -\gamma \int \frac{dV}{V} \quad (6.17)$$

o que leva a seguinte equação

$$\ln P = -\gamma \ln V + c \quad (6.18)$$

que, sendo rearranjada encontra-se

$$\ln P + \gamma \ln V = k \quad (6.19)$$

ou ainda, por fim

$$PV^\gamma = \text{constante} \quad (6.20)$$