
Eficiencia de Máquina Térmica Cuántica; Ciclo de Brayton

Walter Urbano¹, Elizabeth Iglesias^{2*}

Noviembre 20, 2018

1. Universidad Autónoma de Baja California 2. UABC* Email: wurbano@uabc.edu.mx, piglesias@uabc.edu.mx

Abstract

Se analizó el ciclo cuántico de Brayton usando un sistema bidimensional de un pozo de potencial con periodicidad espacial de dos estados. El trabajo y el calor durante los procesos análogos cuánticos se extrajeron del Hamiltoniano, el cual nos lleva a la primera ley de la termodinámica para un sistema cuántico. Como resultado de un análisis del ciclo de Brayton, se obtuvo la eficiencia para este sistema cuántico. La eficiencia obtenida puede ser expresada y tener dependencia únicamente de las dimensiones del pozo

Introducción

En termodinámica, las máquinas térmicas son sistemas que pueden realizar trabajo mecánico dada una fuente de energía en forma de calor. Una máquina térmica obtiene energía de un depósito de alta temperatura, sin embargo, parte de la energía suministrada por el depósito no es convertida en energía mecánica. Dado que estas máquinas no son perfectamente eficientes, parte de la energía que se le suministra no es completamente convertida en trabajo mecánico sino que esta pasa a un depósito de baja temperatura. Es posible determinar la eficiencia de una máquina térmica con la siguiente expresión

$$\eta = \frac{W}{Q_H}, \quad (1)$$

donde W es la cantidad de trabajo que la máquina realiza dada una cantidad de calor Q_H . Por conservación de la energía se puede mostrar que la cantidad de calor Q_L que se libera del sistema está dada por (Zemansky et al., 1997)

$$Q_L = Q_H - W. \quad (2)$$

En años recientes, debido al desarrollo de la nanotecnología y el procesamiento de información cuántica, el estudio de sistemas cuánticos ha comenzado a llamar la atención cada vez más. Como consecuencia, se han propuesto máquinas

térmicas cuánticas (MTC) teóricamente. En una MTC en lugar de tener un gas confinado dentro de un cilindro junto con un pistón, se considera una partícula confinada en un pozo de potencial donde la longitud del pozo juega el papel del pistón en el caso clásico. Recientemente se han considerado varios tipos de pozos de potencial en una MTC, por ejemplo, el caso donde una partícula se encuentra confinada en un pozo infinito cuadrado de 1, 2 y 3 dimensiones. Basándonos en el caso de un pozo cuadrado bidimensional con periodicidad en una de sus direcciones, realizaremos un análisis del caso bidimensional considerando periodicidad en ambas direcciones para el ciclo de Brayton (Herrera et al., 2017).

Métodos

Se recurrió a la ecuación de Shrödinger, resolviéndola para este caso particular. Reescribiendo la ecuación de Shrödinger donde $V(r) = 0$ dentro del pozo, tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \varphi(x, y) = E\varphi(x, y), \quad (3)$$

proponiendo una solución de la forma $\varphi(x, y) = \phi(x)\phi(y)$ y utilizando el método de separación de variables para resolver esta ecuación obtenemos que las soluciones para (2) son de la forma

$$\phi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (4)$$

$$\phi(y) = a \sin(py) + b \cos(py), \quad (5)$$

los factores k y p son constantes. Partiendo de estas soluciones vamos a considerar la condición de periodicidad $\phi(x) = \phi(x + 2\pi R)$ y $\phi(y) = \phi(y + 2\pi r)$ al igual que para sus derivadas, respectivamente. Entonces, partimos aplicando esta condición para $\phi(x)$ de manera que

$$A \sin(kx) + B \cos(kx) = A \sin(kx + 2k\pi R) + B \cos(kx + 2k\pi R), \quad (6)$$

para su derivada

$$A \cos(kx) - B \sin(kx) = A \cos(kx + 2k\pi R) - B \sin(kx + 2k\pi R), \quad (7)$$

despejamos A de las ecuaciones (6) y (7) respectivamente y las igualamos, de modo que

$$\frac{\sin(kx) - \sin(kx + 2k\pi R)}{\cos(kx) - \cos(kx + 2k\pi R)} = -\frac{\cos(kx) - \cos(kx + 2k\pi R)}{\sin(kx) - \sin(kx + 2k\pi R)}, \quad (8)$$

$$[\sin(kx) - \sin(kx + 2k\pi R)]^2 = -[\cos(kx) - \cos(kx + 2k\pi R)]^2, \quad (9)$$

$$\sin^2(kx) - 2\sin(kx + 2k\pi R)\sin(kx) + \sin^2(kx + 2k\pi R) = -\cos^2(kx) + 2\cos(kx + 2k\pi R)\cos(kx) - \cos^2(kx + 2\pi R), \quad (10)$$

utilizamos la identidad $\sin^2(x) + \cos^2(x) = 1$, entonces

$$2 - 2\sin(kx + 2k\pi R)\sin(kx) = 2\cos(kx + 2k\pi R)\cos(kx). \quad (11)$$

Ahora utilizamos las relaciones trigonométricas $\rightarrow 2\sin(\alpha)\sin(\beta) = \cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)$ y $2\cos(\alpha)\cos(\beta) = \cos(\alpha - \beta) + \cos(\alpha + \beta)$, entonces

$$\cos(2k\pi R) = 1, \quad (12)$$

podemos ver que de (11) es necesario que el argumento del coseno sea

$$2k\pi R = n(2\pi), \quad (13)$$

de modo que

$$k = k_n = \frac{n}{R}, \quad (14)$$

siguiendo el mismo procedimiento para $\phi(y)$ llegamos a

$$p = p_s = \frac{s}{r}. \quad (15)$$

Para nuestro caso particula nosotros necesitamos solo las eigen-energías, de modo que estas son,

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2}{R^2} \right), \quad (16)$$

$$E_s = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{s^2}{r^2} \right), \quad (17)$$

de modo que la energía total del sistema es:

$$E_{n,s} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2}{R^2} + \frac{s^2}{r^2} \right). \quad (18)$$

El análisis que deseamos será de forma que dejemos el estado base $s = 1$ y r constantes, entonces definimos la fuerza sobre la barrera en R de la siguiente forma

$$F = -\frac{d}{dR} E(R), \quad (19)$$

donde

$$E(R) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} |a_{n,s}|^2 E_{n,s}. \quad (20)$$

1 Proceso adiabatico e isobárico

1.1 Proceso Adiabático

Asumimos que el estado inicial de la partícula dentro del pozo es una combinación lineal de eigenestados como en la ecuación (18). En un proceso adiabático, el tamaño del pozo de potencial cambia a medida que la pared en dirección x crece. Durante este proceso no se espera ninguna transición de estado, por lo que los valores de las constantes $|a_{n,s}|$ deben permanecer constantes, de modo que el valor de expectación del Hamiltoniano y la fuerza sobre la pared están dados por las ecuaciones (24) y (23) respectivamente.

1.2 Proceso Isobárico

Muchos procesos de transferencia de energía se llevan a cabo en sistemas cerrados a una presión constante. Estos procesos se les conoce como "procesos isobáricos". En este sistema en lugar de la presión constante, la fuerza es quien toma este papel, de modo que durante este proceso la fuerza sobre las paredes del pozo se mantiene constante, esto es

$$F = - \sum_{n,1} |a_{n,1}|^2 \frac{d}{dR} E(R) = constante. \quad (21)$$

Durante el proceso se excita el segundo estado, de modo que hay una transición

de estados, particularmente del estado base al segundo. En contacto con una fuente de alta temperatura la primera ley de la termodinámica sabemos que tiene la forma

$$dE = \delta Q + \delta W. \quad (22)$$

Para obtener la ecuación análoga de la primera ley de la termodinámica es necesario recurrir a la energía del sistema cuántico, en este caso sería el valor esperado del Hamiltoniano

$$E = \sum_{n,1}^{\infty} |a_{n,1}|^2 E_{n,1}, \quad (23)$$

dado que en este proceso varía la energía al igual que las probabilidades $P_{n,1} = |a_{n,1}|^2$, calculamos los diferenciales de (27), de modo que

$$dE = \sum_{n,1}^{\infty} E_{n,1} dP_{n,1} + \sum_{n,1}^{\infty} P_{n,1} dE_{n,1}. \quad (24)$$

Donde δQ seria

$$\delta Q = \sum_{n,1}^{\infty} E_{n,1} dP_{n,1} \quad (25)$$

y δW

$$\delta W = \sum_{n,1}^{\infty} P_{n,1} dE_{n,1}. \quad (26)$$

2 Ciclo cuántico de Brayton

Usando los procesos cuánticos adiabáticos e isobáricos construiremos ahora una máquina cíclica cuántica. Consideraremos, en un caso particular, los primeros dos estados de la función de onda para este sistema. Si iniciamos en el estado base, la fuerza y valor esperado del Hamiltoniano son:

$$F(R) = \frac{\hbar^2}{mR^3} \quad (27)$$

$$E_{1,1} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{R^2} + \frac{1}{r^2} \right). \quad (28)$$

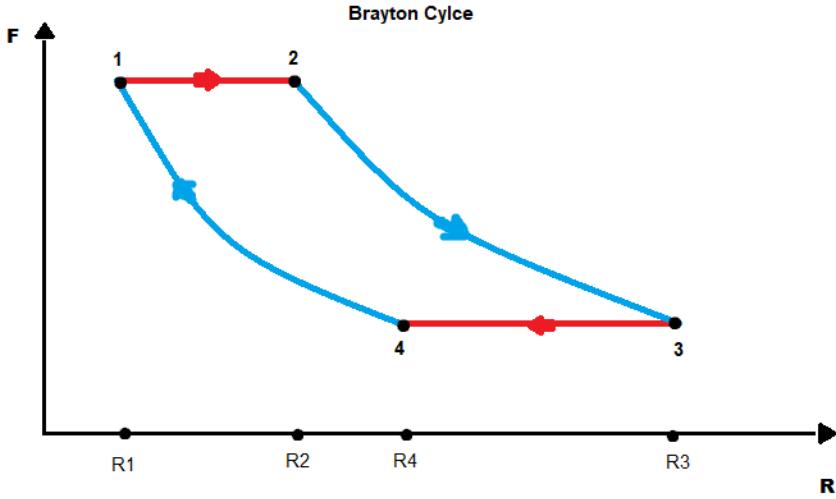


Figure 1: Esto es el análogo de un diagrama PV del ciclo de Brayton el cual consiste de dos proceso isobáricos y dos procesos adiabáticos

2.1 Máquina térmica cuántica de dos estados

Paso 1. Dejemos que la pared se expanda isobáricamente desde R_1 hasta R_2 . De modo que hay una transición de estados, del base al segundo. Entonces, el valor de expectación del Hamiltoniano es

$$E(R) = |a_{1,1}|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{R^2} + \frac{1}{r^2} \right) + |a_{2,1}|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4}{R^2} + \frac{1}{r^2} \right), \quad (29)$$

utilizando la relación $|a_{1,1}|^2 + |a_{2,1}|^2 = 1$ podemos expresar la ec. (28) de la siguiente forma

$$E(R) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[(4 - 3|a_{1,1}|^2) \frac{1}{R^2} + \frac{1}{r^2} \right] \quad (30)$$

y la fuerza durante el proceso es

$$F_1(R) = \frac{\hbar^2}{mR^3} \left[(4 - 3|a_{1,1}|^2) \right]. \quad (31)$$

Dado que la fuerza debe permanecer constante durante el proceso isobárico, igualamos esta fuerza a la ecuación (26) que es la fuerza sobre la pared en el

estado base, de modo que

$$F_1(R) = F(R), \quad (32)$$

$$\frac{\hbar^2}{mR^3} \left[(4 - 3|a_{1,1}|^2) \right] = \frac{\hbar^2}{mR_1^3}, \quad (33)$$

$$R^3 = R_1^3 (4 - 3|a_{1,1}|^2), \quad (34)$$

De aquí podemos observar que el máximo valor que puede tomar R durante la expansión hasta el segundo estado es $R = R_2 = 4^{1/3}R_1$.

Si sustituimos (33) en (30) obtenemos

$$F_1(R) = \frac{\hbar^2}{mR_1^3} = \text{constante}. \quad (35)$$

y verificamos que la fuerza durante el proceso isobárico es constante.

Paso 2. Seguimos expandiendo al sistema adiabáticamente desde $R_2 \rightarrow R_3$, como lo describimos anteriormente, durante este proceso no se esperan transiciones entre estados de modo que la fuerza durante este proceso es

$$F_2(R) = \frac{4\hbar^2}{mR^3}. \quad (36)$$

Paso 3. Ahora comprimimos isobáricamente el sistema dejando que la pared se contraiga desde $R_3 \rightarrow R_4$. El sistema cae del estado excitado al estado base, de modo que la fuerza durante el proceso es

$$F_3(R) = \frac{\hbar^2}{mR^3} \left[(4 - 3|a_{1,1}|^2) \right], \quad (37)$$

como la fuerza debe ser constante, igualamos esta fuerza a la ec. (35) cuando se está totalmente en $R = R_3$, entonces

$$F_3(R) = \frac{\hbar^2}{mR^3} \left[(4 - 3|a_{1,1}|^2) \right] = \frac{4\hbar^2}{mR_3^3} \quad (38)$$

$$\frac{\hbar^2}{mR^3} \left[(4 - 3|a_{1,1}|^2) \right] = \frac{4\hbar^2}{mR_3^3} \quad (39)$$

$$R^3 = \frac{R_3^3}{4} (4 - 3|a_{1,1}|^2). \quad (40)$$

Ahora podemos ver que el valor mínimo que se puede alcanzar durante la compresión isobárica es cuando $|a_{1,1}|^2 = 1$

$$R_4 = \left(\frac{1}{4}\right)^{1/3} R_3. \quad (41)$$

Si sustituimos (39) en (36) verificamos que

$$F_3(R) = \frac{4\hbar^2}{mR_3^3} = cte. \quad (42)$$

Paso 4. De nuevo comprimimos el sistema adiabáticamente desde $R_4 \rightarrow R_1$. De modo que completamos el ciclo con este último proceso. La fuerza durante este proceso es

$$F_4(R) = \frac{\hbar^2}{mR^3}. \quad (43)$$

3 Eficiencia de la máquina térmica cuántica de Brayton

Para determinar la eficiencia del ciclo de Brayton necesitamos calcular el trabajo realizado en cada uno de los procesos termodinámicos cuánticos, esto es

$$W = \int_{R_1}^{R_2=4^{1/3}R_1} F_1(R)dR + \int_{R_2=4^{1/3}R_1}^{R_3} F_2(R)dR + \int_{R_3}^{R_4=\frac{1}{4^{1/3}}R_3} F_3(R)dR + \int_{R_4=\frac{1}{4^{1/3}}R_3}^{R_1} F_4(R)dR, \quad (44)$$

$$W_{net} = \frac{\hbar^2}{mR_1^2} \left(-\frac{3}{2} + \frac{2}{4^{2/3}} + 4^{1/3} \right) - \frac{\hbar^2}{mR_3^2} \left(\frac{4}{4^{1/3}} + \frac{4^{2/3}}{2} - 6 \right), \quad (45)$$

haciendo una aproximación, llegamos a lo siguiente

$$W_{net} = \frac{3\hbar^2}{2mR_1^2} \left(\sqrt[3]{2^2} - 1 \right) - \frac{3\hbar^2}{mR_3^2} \left(\sqrt[3]{2} - 2 \right) \quad (46)$$

pareciera que el trabajo neto podría ser negativo, pero como $R_1 < R_3$ el término positivo del lado derecho de la igualdad es más grande que el negativo.

Ahora calculemos el calor utilizando la siguiente expresión

$$\delta Q_H = \sum_{n,1}^2 E_{n,1} dP_{n,1} \quad (47)$$

$$\sum_{n,1}^2 E_{n,1} dP_{n,1} = E_{1,1} dP_{1,1} + E_{2,1} dP_{2,1} \quad (48)$$

donde de la ecuación 34

$$P_{1,1} = |a_{1,1}|^2 = \frac{1}{3} \left(4 - \frac{R_1^3}{R_1^3} \right) \quad (49)$$

y

$$P_{2,1} = |a_{2,1}|^2 = 1 - \frac{1}{3} \left(4 - \frac{R_1^3}{R_1^3} \right). \quad (50)$$

Sustituyendo en 48 e integrando de R_1 a R_2 obtenemos Q_H , de modo que

$$Q_H = \frac{3\hbar^2}{2mR_1^3} \left(R_2 - R_1 \right) \quad (51)$$

sustituimos el valor de R_2

$$Q_H = \frac{3\hbar^2}{2mR_1^3} \left(\sqrt[3]{4}R_1 - R_1 \right). \quad (52)$$

$$Q_H = \frac{3\hbar^2}{2mR_1^3} \left(\sqrt[3]{4} - 1 \right), \quad (53)$$

Para calcular la eficiencia debemos simplemente calcular la razón del trabajo obtenido entre la energía que se invirtió, entonces

$$\eta = \frac{W_{net}}{Q_H}, \quad (54)$$

sustituyendo valores obtenemos

$$\eta = \frac{\frac{3\hbar^2}{2mR_1^2} \left(\sqrt[3]{2^2} - 1 \right) - \frac{3\hbar^2}{mR_1^3} \left(\sqrt[3]{2} - 2 \right)}{\frac{3\hbar^2}{2mR_1^3} \left(\sqrt[3]{4} - 1 \right)}, \quad (55)$$

$$\eta = 1 - \sqrt[3]{16} \left(\frac{R_1}{R_3} \right)^2. \quad (56)$$

Conclusiones

En la siguiente figura se muestra una la eficiencia del ciclo cuántico de Brayton dependiente del cociente de las distancias R_1 y R_2 .

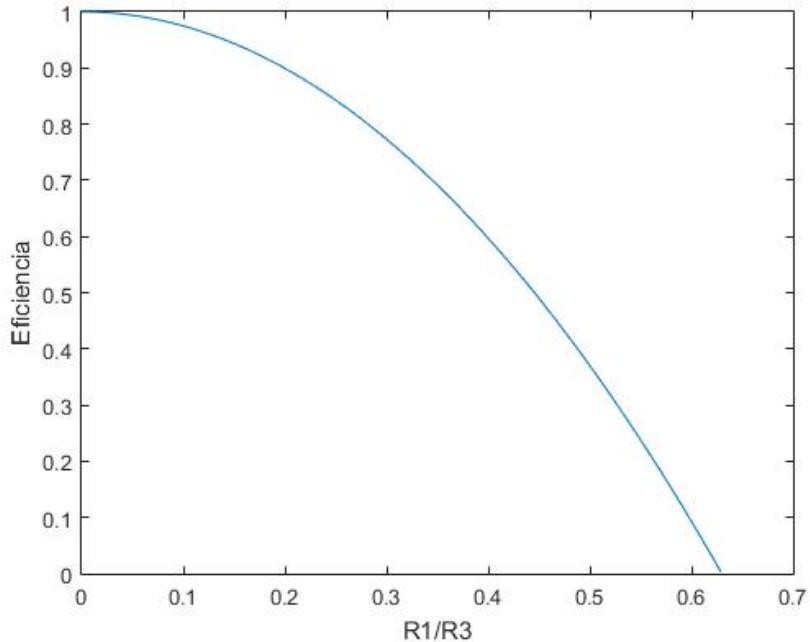


Figure 2: Resultado gráfico de la eficiencia de Brayton.

Se puede apreciar que la eficiencia máxima es de 1 y que el cociente de los distancias nunca alcanza la unidad, de ser así, se tendría una eficiencia negativa, lo cual no tendría sentido físico.

References

- [1] Bender, C. M., & Brody, D. C.,(2000), *Quantum mechanical Carnot engine*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 33(24), 4427.
- [2] Herrera, H.K, Carvajal J.C, Rosales O., Villarreal R.C & Iglesias P.E., (2017), *Dimensionality and geometry effects on a quantum Carnot engine efficiency*. Revista de Ciencias de la Ingeniería y Tecnología. 1 (1). (Aceptado).
- [3] De La Peña, L. (2014). *Introducción a la mecánica cuántica*. Fondo de Cultura Económica.

-
- [4] Eny, L. & Agus, P., (2013). *Quantum Heat Engines; Multiple-State 1D Box System* Journal of Modern Physics.