XXX Congresso de Iniciação Científica UNICAMP

MÁQUINAS TÉRMICAS QUÂNTICAS BASEADAS EM JUNÇÕES JOSEPHSON PARA APLICAÇÕES EM ELETRODINÂMICA QUÂNTICA DE CIRCUITOS SUPERCONDUTORES E COMPUTAÇÃO QUÂNTICA

Palavras-chave: Máquinas Térmicas Quânticas, Termodinâmica Quântica, Circuitos Quânticos Supercondutores, Junções Josephson

Gustavo Moreto - IFGW - Unicamp

Prof. Dr. Francisco Rouxinol - IFGW - Unicamp

OBJETIVOS DA PESQUISA

O objeto de estudo do projeto foram as máquinas térmicas quânticas baseadas em junções Josephson. As junções Josephson são importantes dispositivos da eletrodinâmica quântica de circuitos supercondutores, um dos elementos fundamentais dos Qubits supercondutores. É possível operar ciclos térmicos nestas junções, sendo uma realização experimental do paradoxo proposto por Maxwell onde um sistema violaria a segunda lei da termodinâmica. O projeto abordou o estudo e a simulação do trabalho e da variação de entropia em um ciclo de Szilard, uma proposta para implementação do paradoxo de Maxwell, e como este ciclo é implementado em métodos experimentais atuais. O objetivo do projeto foi compreender a dinâmica de operação do ciclo de Szilard em um sistema baseado em junção Josephson e como as trocas de calor, realização de trabalho e variação da entropia se dão neste processo.

Os circuitos para execução do ciclo térmico de Szilard utilizam junções Josephson configuradas como transistores de elétron único, ou caixas de pares de Cooper, e o experimento precisa ser realizado em ultra baixa temperatura. Para isso o sistema é inserido dentro de uma diluidora de refrigeração que atinge temperaturas de até 10mK.

Ao longo do projeto pude acompanhar todo o processo de fabricação das junções Josephson, tipicamente da ordem de dezenas de nanômetros, envolvendo deposição de filmes finos, litografia por feixe de elétrons, integração das amostras à diluidora, operação da mesma e o processo de medição das amostras..

METODOLOGIA DA PESQUISA

Para o desenvolvimento da pesquisa, iniciei os estudos pelas bases da termodinâmica clássica, revendo as leis e aplicações da teoria, revendo o conceito de entropia pela termodinâmica clássica e posteriormente pela abordagem da física estatística. Em seguida foquei no estudo do motor de Szilard, analisando as diferentes possibilidades de construção deste sistema, e como o trabalho médio realizado pelo sistema pode ser calculado ao longo da realização de vários ciclos térmicos do motor.

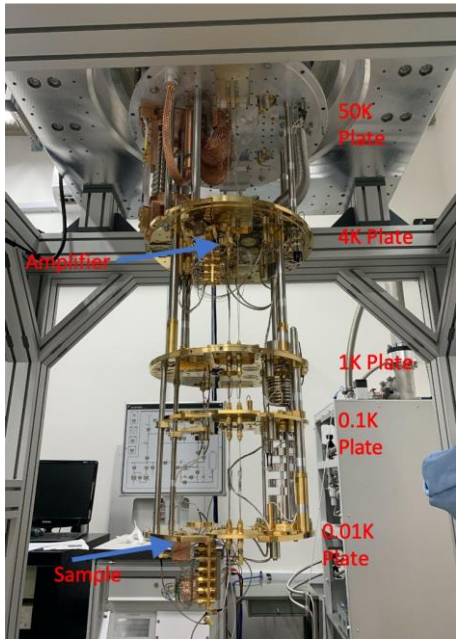

Fig 1: Diluidora de refrigeração. Os experimentos com as máquinas térmicas quânticas baseadas em junções Josephson são realizados em temperaturas em torno de dezenas à centenas de mK, dentro de uma diluidora de refrigeração. *Foto tirada no LFDQ na Unicamp.*

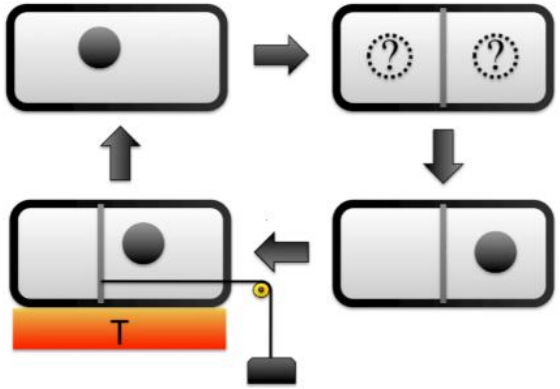

Fig 2: Ciclo de um motor de Szilard. (fonte: Kim, S. W., Sagawa, T., De Liberato, S. & Ueda, M. Quantum Szilard Engine. Physical Review Letters 106, 070401. issn: 0031-9007, 1079-7114***)***

Nesta etapa trabalhei com a simulação dos ciclos térmicos no motor de Szilard para um motor com uma única partícula, com e sem erro na medição da posição da partícula, e para um motor de multi partículas. As simulações utilizaram uma distribuição aleatória das partículas dentro do motor para computação do trabalho realizado ao longo do ciclo.

Por fim estudei as realizações experimentais atuais dos ciclos de Szilard em junções Josephson, e como se mede as trocas de calor, realização de trabalho e variação da entropia ao longo dos ciclos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Desde sua formulação, a segunda lei da termodinâmica, que atesta que nenhum processo espontâneo se dá no sentido de diminuir a entropia de um sistema, vem sendo alvo de inúmeras tentativas de contestação. Talvez a mais impactante foi a proposta realizada por Maxwell[1] em 1871, onde ele propôs um experimento mental que elaborava uma situação de violação da segunda lei da termodinâmica.

Em seu trabalho "Uma Teoria do Calor"[1] Maxwell propôs que se houvesse uma entidade capaz de saber a velocidade de cada molécula de um gás confinado em um recipiente, e que este fosse conectado a outro recipiente inicialmente vazio por uma comporta que este ser pudesse abrir e fechar de forma reversível, portanto toda vez que uma molécula de alta velocidade viesse em direção a porta, este ser poderia abri-la deixando a molécula de alta velocidade passar para o recipiente ao lado e ao não abrir a comporta para as moléculas de baixa velocidade, as manteria no recipiente inicial. Assim, com o tempo o sistema sairia da configuração de um único recipiente preenchido por um gás em equilíbrio a uma temperatura T para dois recipientes preenchidos por um gás a temperaturas TL < T e TH > T a custo energético zero, violando assim a segunda lei da termodinâmica. Este veio a ficar conhecido como o paradoxo do Demônio de Maxwell.

Anos se passaram até que o paradoxo, que ficou conhecido como paradoxo do demônio de Maxwell, fosse resolvido por Charles Bennet[2], utilizando o principio de Landauer[3] que relaciona energia com processos irreversíveis. A relação de energia com informação já havia sido feita anteriormente por Shannon[4], ao associar o teorema H de Boltzmann, que formulou um modelo estatístico para a entropia dos sistema físicos, com a informação em redes de comunicação.

Com o passar do tempo e o avanço da tecnologia, surgiram propostas para a implementação experimental de um demônio de Maxwell. Uma que ganhou grande destaque foi o motor de Szilard[5], proposto por Leo Szilard em 1964, onde o motor realizaria uma quantidade $W = kbT\ln(2)$ de trabalho por ciclo, retirando essa energia de um único reservatório térmico. Atualmente, o grande avanço na construção de dispositivos em escalas nanométricas possibilitou a construção de sistemas que permitem o controle individual do tunelamento de cargas do sistema, possibilitando a execução de um ciclo do motor de Szilard na prática[6–8].

O princípio de Landauer (1961)[3] relaciona energia com irreversibilidade lógica, e diz que um sistema despende a quantidade $kbT\ln(2)$ de energia para cada bit de informação apagada. Brillouin (1951)[9] antes de Landauer, apresentou a ideia de que a medição de um sistema demanda energia, compensando a energia extraída do sistema pelo Demônio de Maxwell. Posteriormente foi Bennet quem avançou na resolução deste paradoxo utilizando o princípio de Landauer, ao argumentar que a medição pode ser realizada de forma adiabática e portanto a custo zero, e que na verdade o balanço entrópico do ciclo de Szilard se dá ao apagar a memória do Demônio, perdendo a informação sobre a posição da partícula.

Estudos mais recentes[10] formularam essa resolução levando em conta o custo ao se realizar a medição e a limpeza da memória com o resultado da medida, estabelecendo o limite para o trabalho total do ciclo

$$Wmedida + Wlimpeza \leq kbT\,I \qquad \text{(eq.1)}$$

onde I é a informação ganha pela medida. Este princípio pode ser ilustrado por um processo simples de apagamento de um dispositivo de dois estados atuando como uma memória. Em seu trabalho Landauer faz uma análise detalhada para um potencial biestável. Aqui vamos ver o caso de um motor de Szilard atua como uma memória. Ao inserir a partição dentro do compartimento do motor e realizar a medida, nosso sistema poderá estar em dois estados, com a partícula à esquerda ou direita da partição. Este sistema pode atuar como uma memória, onde a partícula do lado esquerdo significa zero e do lado direito significa 1. Assim procedimento de apagamento da memória pode consistir em um retorno pra zero, ou seja, após o processo a partícula estará com certeza do lado esquerdo da partição, independente de onde ela estava antes.

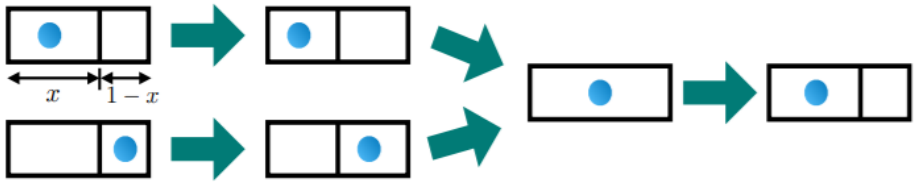

Fig 3: Exemplo de um apagamento de memória do tipo retorno para o zero. O apagamento da memória da medida da posição da partícula é responsável pelo balanço entrópico do ciclo de Szilard e a resolução do paradoxo do Demônio de Maxwell. (Fonte: Pal, P. S. & Jayannavar, A. M. Maxwell's Demon, Szilard Engine and Landauer Principle.)

Tendo que o trabalho de expansão de um gás ideal à temperatura constante é dado por

$$W = \int PdV = \frac{n}{\beta}\ln\left(\frac{Vf}{Vi}\right) \qquad \text{(eq.2)}$$

onde o n é o número de mols do gás, $\beta = 1/kbT$ *e* Vf *e* Vi *são os volumes finais e iniciais respectivamente,* para um motor de Szilard de uma partícula confinada em um volume de comprimento unitário onde a partição é inserida na posição $x,(0 \leq x \leq 1)$,e a posição é medida com uma taxa de acerto de $(1-e),(0 \leq e \leq 1)$. Temos que o trabalho realizado pela partícula sobre a partição, proporcional a escala de energia do reservatório térmico que o motor está em contato, é dado por

$$\beta W = ln\left(\frac{xf}{xi}\right) \qquad \text{(eq.3)}$$

onde xf *e* xi *são as posições final e inicial da partição.*

Após a medição da posição da partícula o sistema é preparado para fornecer trabalho acoplando à partição um motor por exemplo que fornece energia conforme a partição se expande. Caso aconteça um erro na medição da posição da partícula, o sistema consumirá energia ao invés de fornecer. Assim, podemos delimitar posições finais $v1$ *e* $v0$ para a expansão da partição e através de simulações considerando posições aleatórios iniciais da partícula podemos computar o trabalho realizado pelo motor.

O primeiro resultado é o trabalho médio $\langle W \rangle$ para um motor de Szilard de uma partícula sem erro na medição da posição da partícula. Vemos que o trabalho máximo extraído para uma motor de Szilard de uma partícula sem erro na medição da posição é para a partição sendo inserida de modo que divida o motor em duas partes iguais, com o valor de

$$\beta\langle W \rangle = \ln(2). \qquad \text{(eq.4)}$$

Em seguida considerei a possibilidade de erro na medição da posição da partícula uma taxa e. Isso implica que a expansão seja feita até um certo limite $v1$ *e* $v0$, ao invés de até o volume total do motor, já que no caso de erro da medida da posição da partícula a partição demandaria um energia infinita para comprimir a partícula até um volume zero.

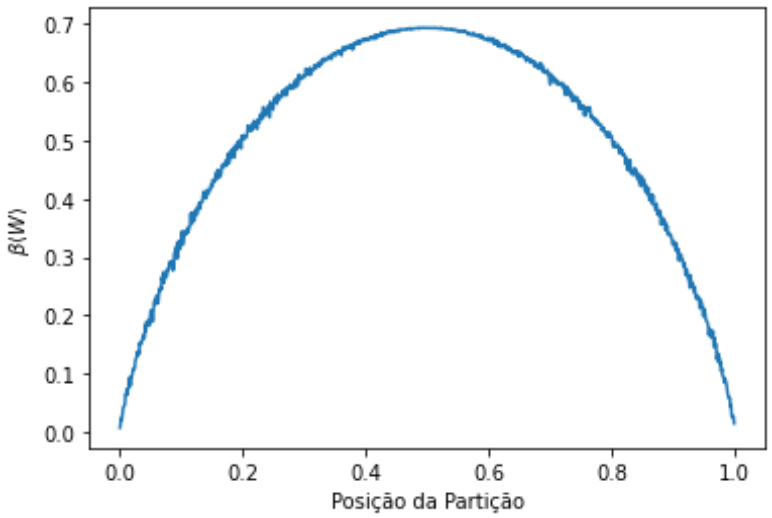

Fig 4: Resultado da simulação do trabalho médio realizado por um motor de Szilard de uma partícula sem erro na medição da posição da partícula para diferentes posições de inserção da partição.

Também considerei o caso onde temos N partículas dentro do motor. Dessa forma, após a inserção da partição dividindo as partículas em dois grupos, um de m partículas a direita da partição e outro de $N-m$ partículas a direita da partição, o sistema irá expandir até uma posição final l_{eq}^{m}. Considerando a substância do motor como sendo um gás ideal, temos que a posição de equilíbrio se dá quando os dois lados exercem a mesma pressão sobre a partição, ou seja

$$\frac{mkbT}{l_{eq}^{m}} = \frac{(N-m)kbT}{1-l_{eq}^{m}} \rightarrow l_{eq}^{m} = \frac{m}{N}. \qquad \text{(eq.5)}$$

O trabalho médio para um motor de multi partículas pode ser deduzido a partir da probabilidade de m das N partículas estarem em um lado da partição inserida na posição x, conforme mostrado por P. S. Pal, A. M. Jayannavar[11], e é dado por

$$\langle W \rangle = -kbT\sum_{m=0}^{N}\binom{N}{M}x^{m}(1-x)^{N-m}ln\left[\left(\frac{x}{\alpha}\right)^{m}\left(\frac{1-x}{1-\alpha}\right)^{N-m}\right] \qquad \text{(eq.6)}$$

onde $\alpha = \frac{m}{N}$.

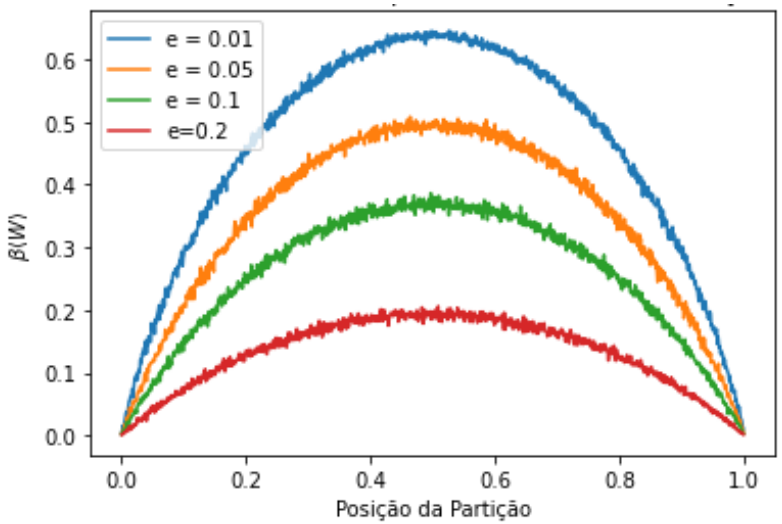

Fig 5: Resultado da simulação do trabalho médio realizado por um motor de Szilard de uma partícula com erro na medição da posição da partícula para diferentes posições de inserção da partição e diferentes taxas de erro na medição.

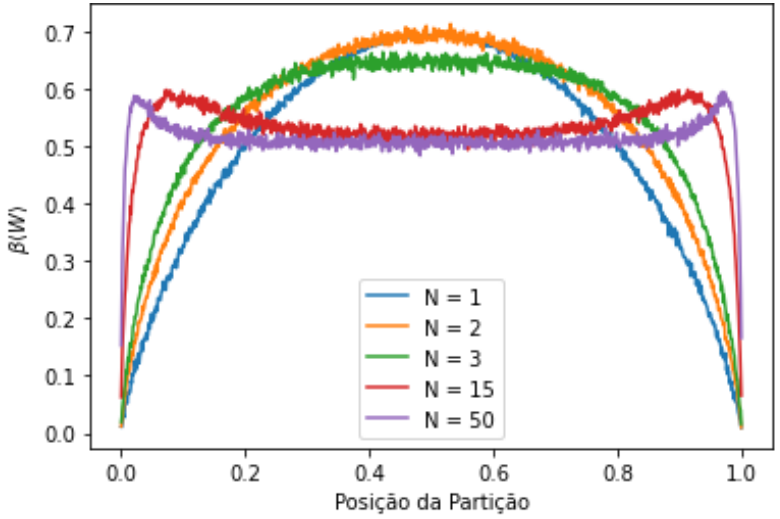

Fig 6: Resultado da simulação do trabalho médio realizado por um motor de Szilard de N partículas sem erro na medição da posição da partícula para diferentes posições de inserção da partição.

Dos resultados das simulações, podemos notar que o trabalho médio máximo extraído de um motor de Szilard sem erro na medição da posição da partícula é de $\frac{1}{\beta}\ln\left(\frac{vf}{vi}\right) = \frac{1}{\beta}\ln 2$ por partícula, e vemos que um motor de Szilard de multi partículas é enviesado, tendo sua máxima eficiência para a partição inserida nas extremidades do motor.

Um modelo para a implementação experimental do motor de Szilard é através das chamadas máquinas térmicas quânticas. Uma forma de construção deste tipo de sistema é utilizando junções Josephson em uma configuração conhecida como transistor de elétron único (SET), ou caixa de pares de Cooper. O SET pode ser formado por uma junção Josephson, podendo atuar como uma caixa de pares de Cooper. Assim, para baixas temperaturas os pares de Cooper podem tunelar um a um para dentro ou para fora da ilha, mantendo uma diferença de uma única carga entre os polos da JJ. Utilizando outro SET para medir a corrente de tunelamento e controlando o potencial aplicado entre as extremidades da caixa podemos operar um ciclo térmico no dispositivo.

A probabilidade do par de Cooper excedente estar dentro ou fora da ilha depende do potencial Vg, que pode ser dado em função da carga extra, conforme

$$n_g = \frac{C_1 V_g}{e^*} \qquad \text{(eq.7)}$$

onde e^* é a carga do par de Cooper e n_g podendo variar de 0 a 1. Para $n_g = 0{,}5$ temos o estado de degenerescência, sendo igualmente provável a carga extra estar em ambos os lados da JJ. A energia do sistema é dada conforme

$$E_n = E_c(n - n_g)^2 \qquad \text{(eq.8)}$$

onde $E_c = e^{*2}/2Ctot$ e n é o estado do sistema, sendo 1 para a carga dentro da ilha e 0 para a carga fora. Assim, quando ocorre um tunelamento a energia do sistema se altera. Como mostrado por Koski[12], a variação da energia do sistema em cada tunelamento é igual ao calor produzido, conforme

$$Q = \pm E_c(2n_g - 1) \qquad \text{(eq.9)}$$

sendo o sinal positivo para as transições $n : 0 \rightarrow 1$, negativo para $n : 1 \rightarrow 0$ e n_g o valor do potencial aplicado no momento do tunelamento.

O ciclo de Szilard operado neste dispositivo consiste em a partir do estado de degenerescência, medir a posição da carga extra e aplicar rapidamente um potencial aprisionador de modo que não há troca de calor entre o sistema e o ambiente (n_g = 1 para n = 1 "carga dentro da ilha" e n_g = 0 para n = 0 "carga fora da ilha") . Em seguida, retorna-se o sistema de forma quase-estática para o estado de degenerescência. Ao aplicar o potencial após a medida da posição da carga, o sistema realiza trabalho já que a energia interna diminui e não há troca de calor entre o sistema e o reservatório térmico. Em seguida trabalho é realizado sobre o sistema retornando-o ao estado de degenerescência, contudo diminuído pelo valor de $kbT\ln(2)$, que o sistema absorveu do reservatório térmico. Assim, medindo os momentos de tunelamento durante o retorno ao estado de degenerescência é possível computar a geração de calor, o trabalho realizado e a variação de entropia do sistema.

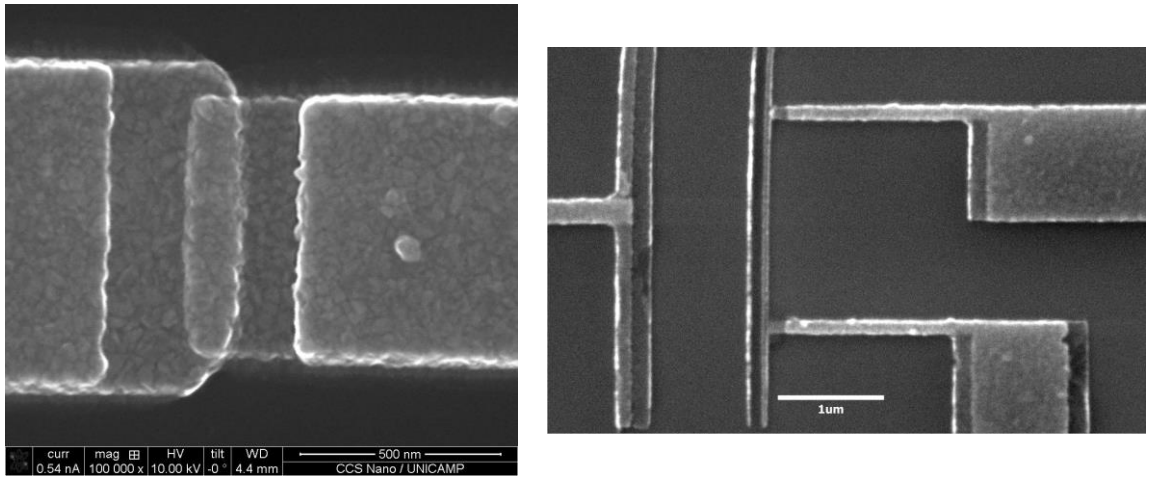

Fig 7: A esquerda, uma junção Josephson, composta por dois supercondutores separados por uma camada de óxido. A direita um SET formado por duas junções Josephson. Imagens cedidas pelo Prof. Dr. Francisco Rouxinol, ambos dispositivos fabricados na Unicamp.

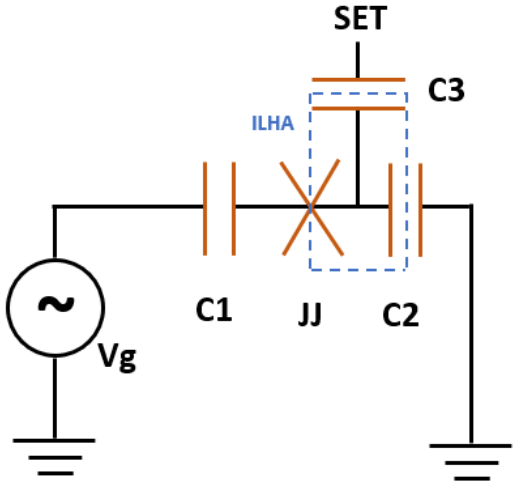

Fig 8: Circuito para a realização do ciclo térmico de Szilard em uma caixa de pares de Cooper.

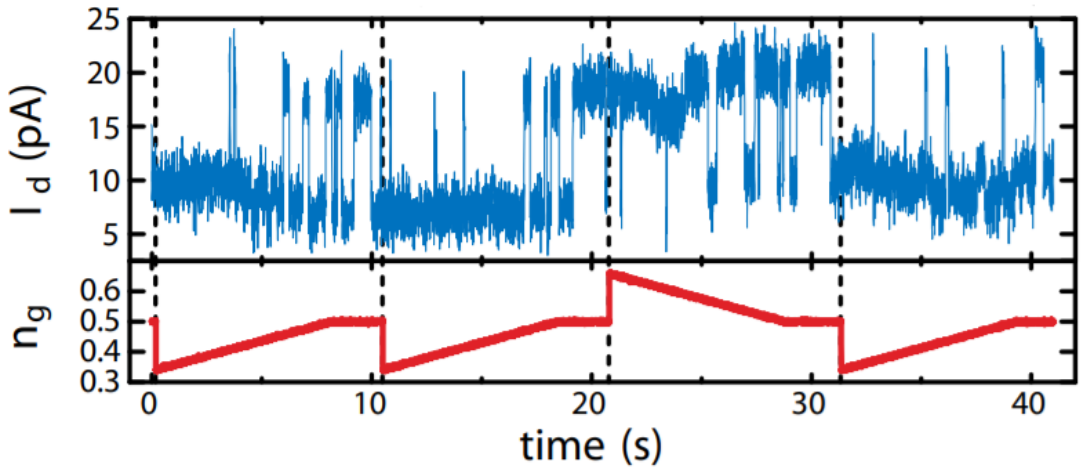

Fig 9: Quatro ciclos de um motor de Szilard em um SET. I_d é corrente de tunelamento indicando a posição da carga extra e n_go potencial aprisionador aplicado. (Fonte: Koski, J. V., Maisi, V. F., Pekola, J. P. & Averin, D. V. Experimental realization of a Szilard engine with a single electron.)

CONCLUSÕES

Umas das leis mais fundamentais da física é a lei do aumento da entropia, que desde sua formulação inicial por Clausius vem sendo alvo de inúmeras tentativas de violação. O paradoxo proposto por Maxwell talvez tenha sido a mais importante delas. Por anos em que este paradoxo ficou sem solução, importantes nomes da ciência, como Shannon, Brillouin, Landauer, Bennet, Szilard e outros, trabalharam e contribuíram para a resolução desta importante questão.

O Motor de Szilard, proposto por Leo Szilard, foi bem sucedido em formular uma possibilidade de implementação do paradoxo do Demônio de Maxwell, onde uma partícula confinada em um recipiente em contato com o reservatório térmico, extrairia uma quantidade de $kbTln(2)$ de energia do reservatório por ciclo executado, violando a segunda lei da termodinâmica. A solução deste paradoxo somente veio quando Bennet, utilizando o princípio de Landauer que relaciona energia com processos irreversíveis, balanceou a equação levando em conta a energia dissipada ao se apagar a informação da medição da posição da partícula, realizada no inicio do ciclo do motor de Szilard, causando um aumento na entropia do sistema de exatamente $kbTln(2)$ por bit de informação apagada, mantendo a entropia total igual a zero, tanto do experimento proposto por Maxwell como do motor de Szilard.

A lei do aumento da entropia se mostrou válida mais uma vez, se mantendo como talvez a lei mais abrangente, a qual todos os processos físicos parecem estar submetidos, juntamente com leis como a da conservação de energia e momento. Ainda assim, a lei da entropia talvez seja ainda mais abrangente pois não só estabelece um limite mas também um sentido para os possíveis processos físicos.

A resolução deste paradoxo foi parte no desenvolvimento de importantes áreas da ciência atual, como a Termodinâmica Quântica, a Teoria da Informação e o desenvolvimento de circuitos quânticos supercondutores. Foi através desta última que séculos depois de ser proposto, o paradoxo do Demônio de Maxwell foi implementado e realizado experimentalmente. Máquinas Térmicas Quânticas são objetos de estudo atuais e comprovaram a diminuição da entropia do sistema local ao se executar um ciclo de Szilard. Estes experimentos são realizados em circuitos que utilizam dispositivos quânticos supercondutores, como as junções Josephson, que são importantes dispositivos da eletrodinâmica quântica de circuitos supercondutores, sendo um dos elementos chaves para os Qbuits supercondutores. O estudo das relações termodinâmicas nestes dispositivos é de grande importância para o entendimento e avanço no controle das dinâmicas destes sistemas.

BIBLIOGRAFIA

1. Maxwell, J. C. Theory of Heat (Cambridge University Press, 1871).

2. Bennett, C. H. The thermodynamics of computation—a review. International Journal of Theoretical Physics 21.

3. Landauer, R. Irreversibility and heat generation in the computing process. IBM Journal of Research and Development 5.

4. Shannon, C. E. A mathematical theory of communication. The Bell System Technical Journal 27.

5. Szilard, L. On the decrease of entropy in a thermodynamic system by the intervention of intelligent beings. Behavioral Science 9.

6. Koski, J. V., Maisi, V. F., Pekola, J. P. & Averin, D. V. Experimental re alization of a Szilard engine with a single electron. en. Proceedings of the National Academy of Sciences 111.

7. Koski, J. V. et al. Distribution of entropy production in a single-eléctron box. en. Nature Physics 9.

8. Koski, J. V., Kutvonen, A., Khaymovich, I. M., Ala-Nissila, T. & Pekola, J. P. On-chip Maxwell's demon as an information-powered refrigerator. Physical Review Letters 115.

9. Brillouin, L. Maxwell's Demon Cannot Operate: Information and Entropy. I. Journal of Applied Physics 22.

10. Sagawa, T. & Ueda, M. Minimal Energy Cost for Thermodynamic Infor-mation Processing: Measurement and Information Erasure. Physical Review Letters 102.

11. Pal, P. S. & Jayannavar, A. M. Maxwell's Demon, Szilard Engine and Landauer Principle.

12. Koski, J. V., Maisi, V. F., Pekola, J. P. & Averin, D. V. Experimental realization of a Szilard engine with a single electron - Suplement. Proceedings of the National Academy of Sciences 111.