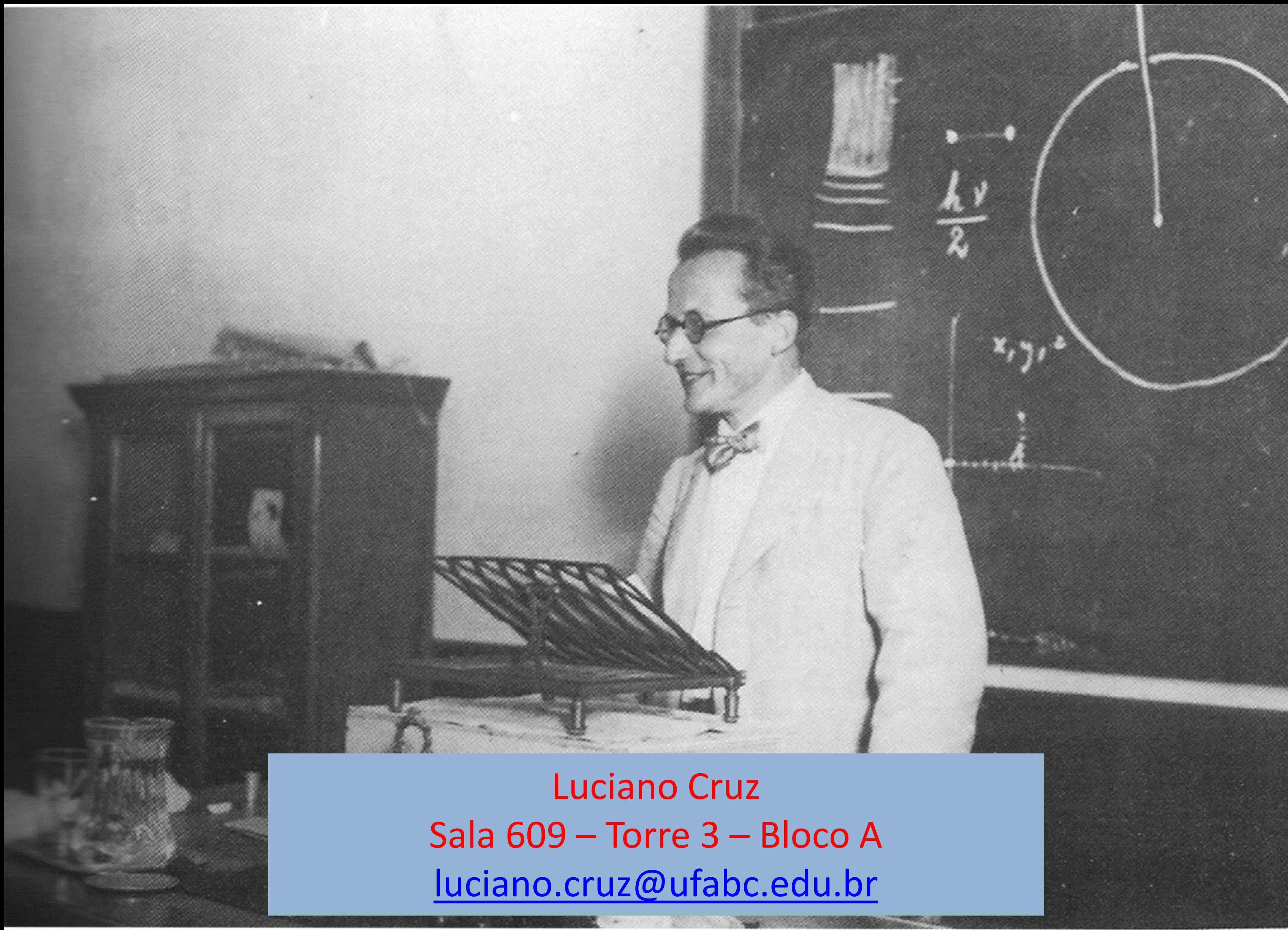
Física Quântica (BCK0103-15)

aula 11 - 2019



Luciano Cruz

Sala 609 – Torre 3 – Bloco A

luciano.cruz@ufabc.edu.br

Na última aula (12/11/19)

- Potenciais simples: potenciais degraus;
- Reflexão, Transmissão de Ondas Quânticas
- Tunelamento.
- Tempo de tunelamento em uma barreira (revisitando o princípio de incerteza de Heisenberg).
- Microscópios de tunelamento e mapeamento de átomos e moléculas.

Na aula de hoje (14/11/19)

- Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico.
- Armadilhas de íons.
- Computação Quântica
- Potenciais em mais de uma dimensão.

A equação de Schrodinger independente do tempo

Para o caso de potenciais independentes do tempo [para V(x,t) = V(x)]

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)}$$

E a solução geral da Equação será dada por:

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}$$

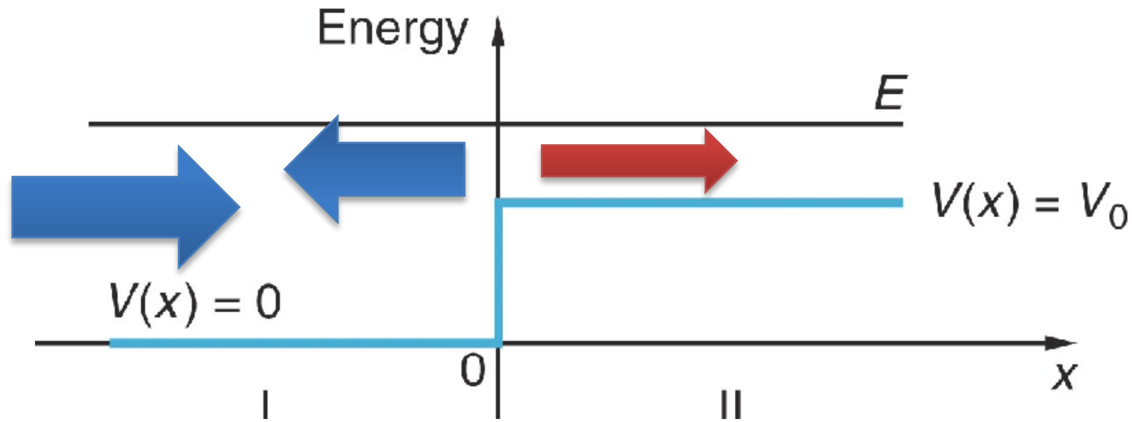
A distribuição de probabilidade pode ser então calculada diretamente como:

$$\boxed{P(x) = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t) = \psi^*(x)\,\psi(x)}$$

Degrau de Potencial

Para o potencial:

$$V = \begin{cases} 0\,, \text{ para } x < 0 \\ V_0\,, \text{ para } x > 0 \end{cases}$$



$$\begin{aligned} \Psi_{inc}(x,t) &= A\,e^{ik_1x-iwt} \\ \Psi_{ref}(x,t) &= B\,e^{-ik_1x-iwt} \\ \Psi_{tra}(x,t) &= C\,e^{ik_2x-iwt} \end{aligned}$$

$$B = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}A \qquad C = \frac{2k_1}{k_1+k_2}A$$

Se considerarmos as correntes de probabilidades temos:

$$j_{\text{inc}} = |A|^2 v_1\,,\; j_{\text{refl}} = -|B|^2 v_1\,,\; j_{\text{trans}} = |C|^2 v_2$$

Onde: $v_j = \hbar\, k_j / m \;\; (j = 1{,}2)$ (que tem unidade de velocidade)

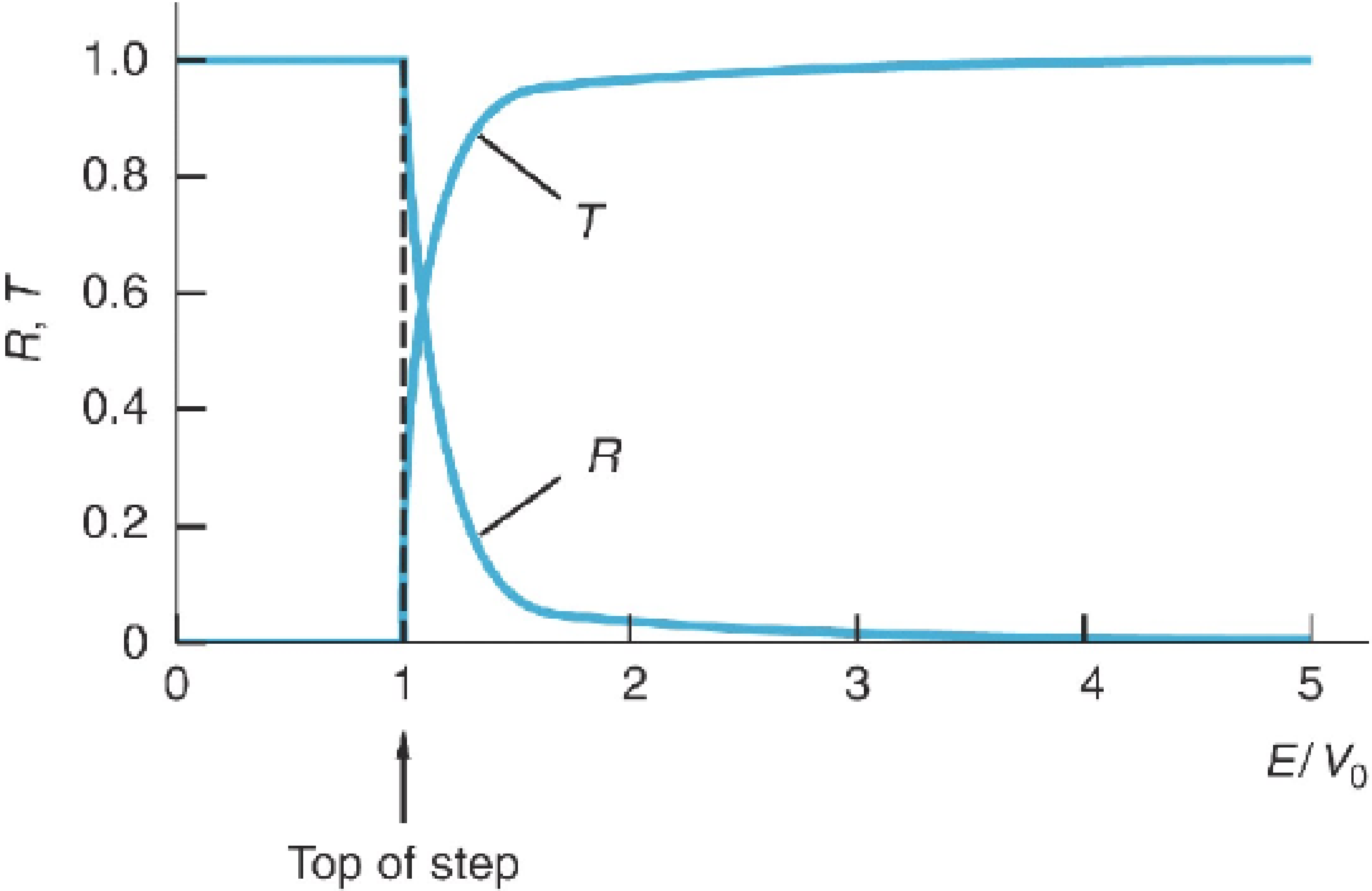
Na interpretação em termos de feixes de partículas, as correntes são proporcinais aos números por unidade de tempo de partículas incidentes, refletidas e transmitidas, respectivamente. Logo, as probabilidade de reflexão (R) e transmissão (T) são dadas por:

$$R = -\frac{j_{\text{refl}}}{j_{\text{inc}}} = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$

$$T = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{inc}}} = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2$$

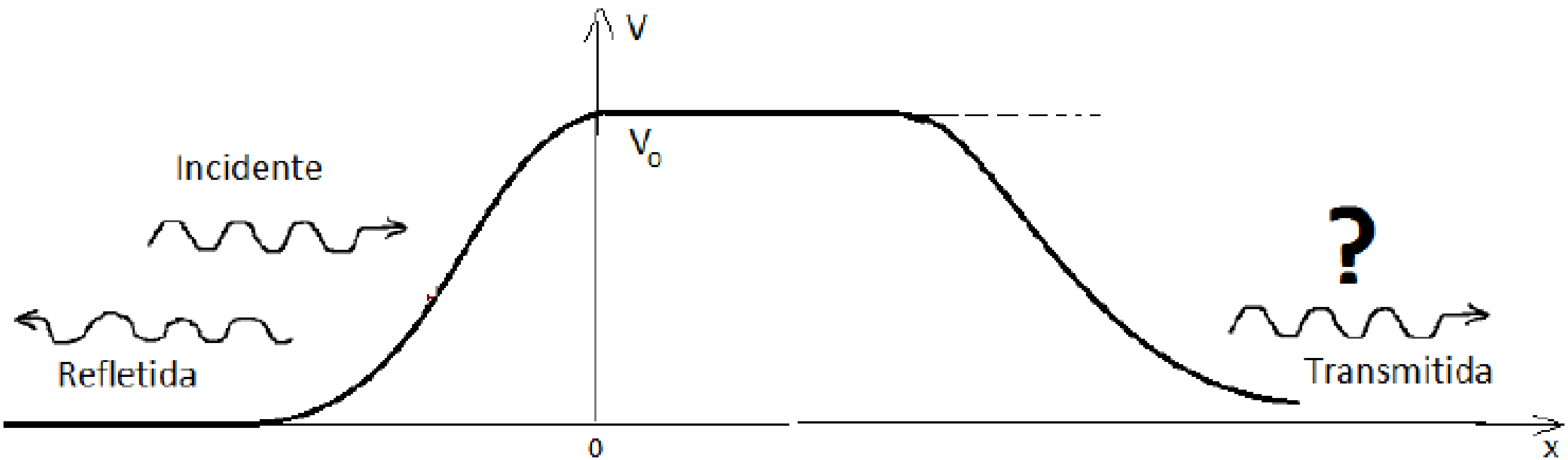
Por fim, temos como coeficientes de Reflexão e Transmissão:

$$\boxed{\begin{aligned} R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \\ T &= \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \end{aligned}}$$



1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0
R, T
T
R
0
1
2
3
4
5
E/ V0
Top of step

A questão do tunelamento

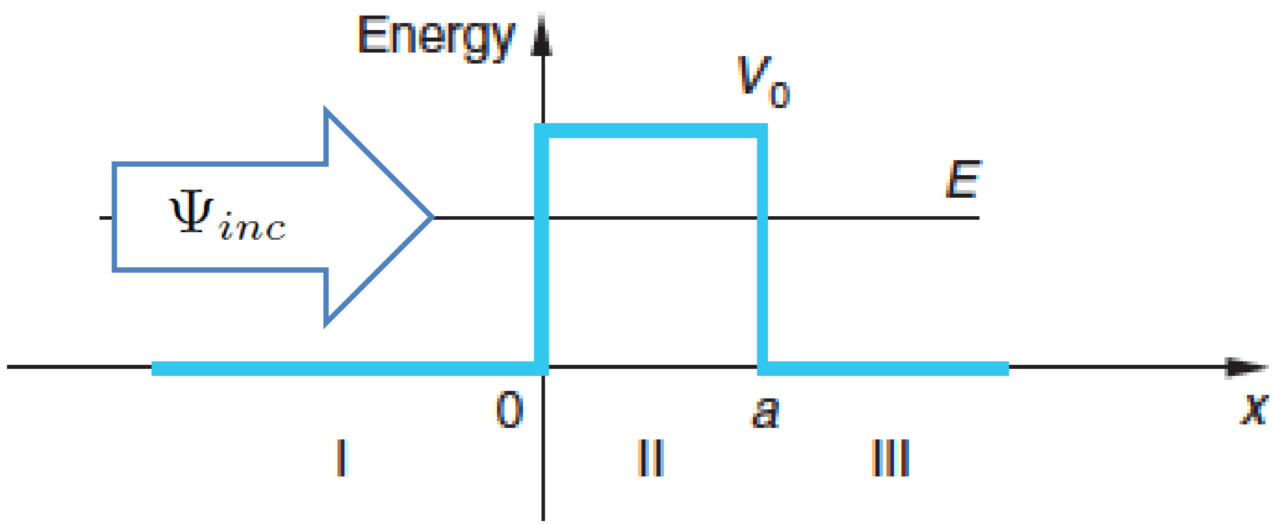


Neste caso, $E < V_0$. Então, como pode haver transmissão após a barreira?

Barreira de Potencial

Considere um potencial definido por:

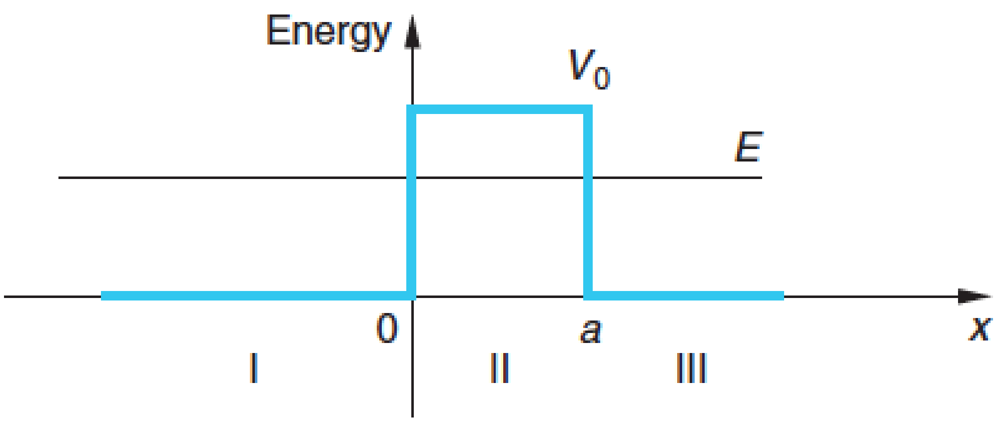
$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } x < 0 \\ V_0 & \text{para } 0 \leq x < a, \\ 0 & \text{para } x \geq a \end{cases}$$



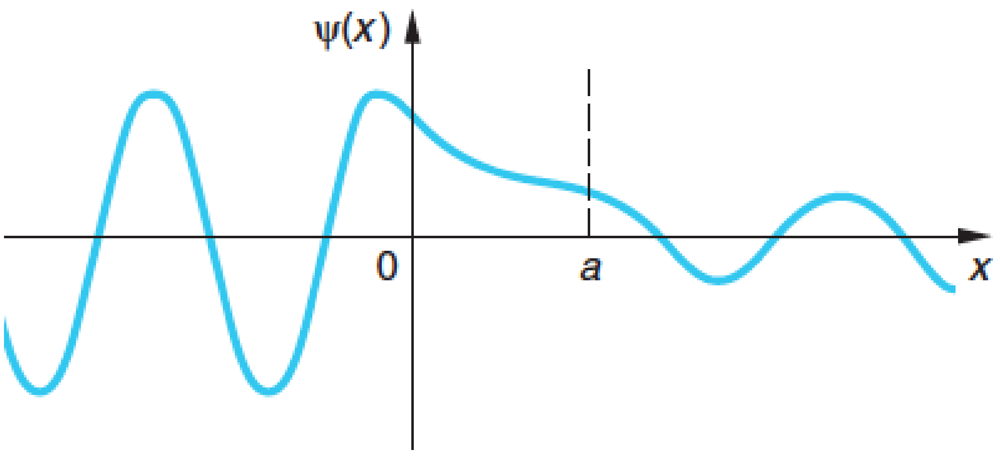
Para um feixe se movendo para a direita, podemos proceder como nas aulas anteriores e dividir o problema em 3 regiões a serem resolvidas.

Pode-se obter o coeficiente de transmissão, que mostra o fenômeno de tunelamento (no caso clássico, este coeficiente de transmissão é nulo).

$$T = \frac{j_{III}}{j_I} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$



$$\boxed{T = \left[1 + \frac{\left(k_1{}^2 + \alpha^2\right)\sinh^2(\alpha a)}{4k_1{}^2\alpha^2}\right]^{-1}}$$

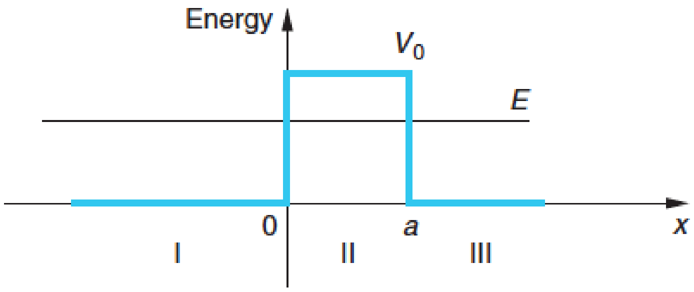


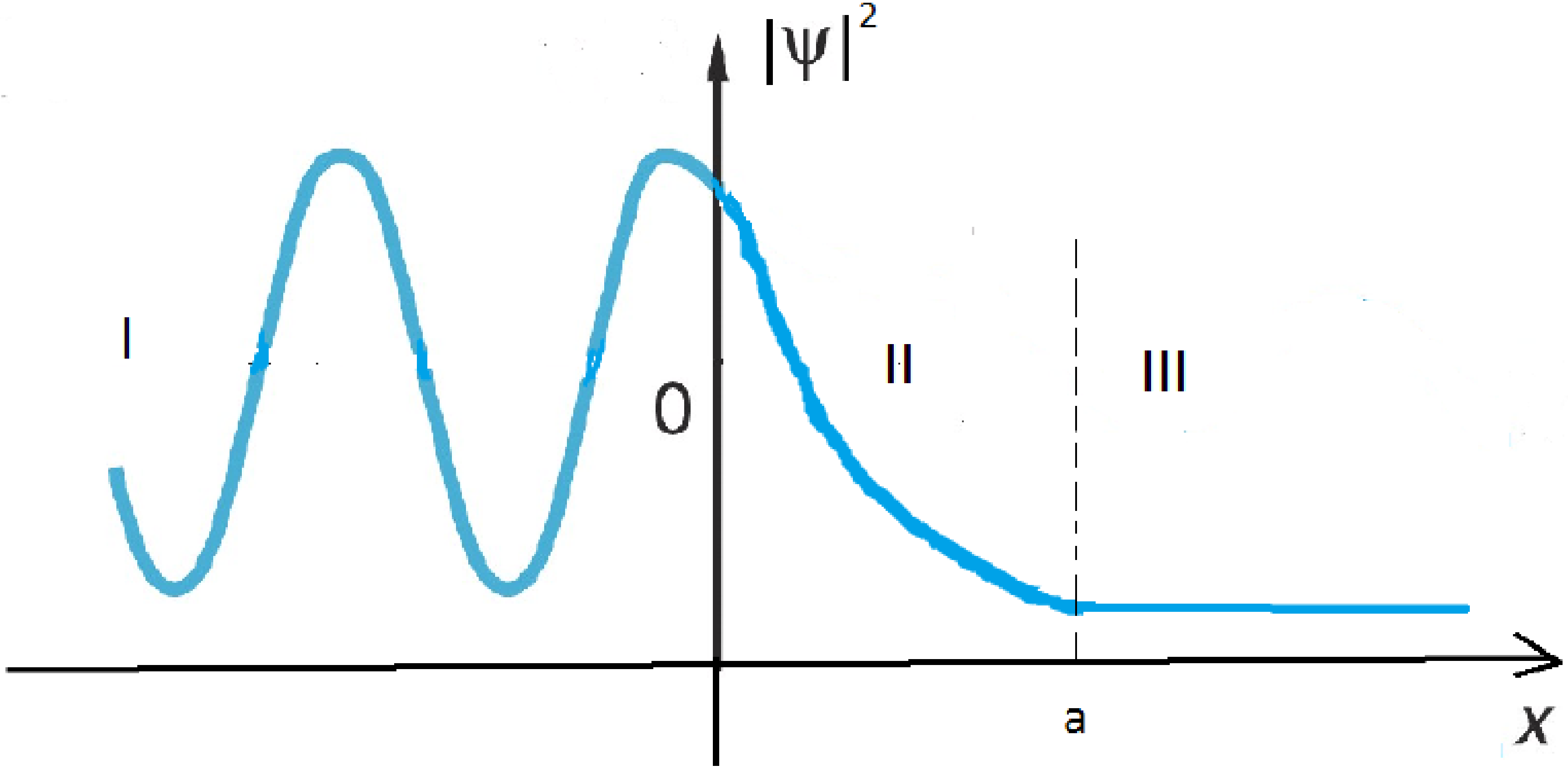
No caso de **αa >>1**, podemos escrever uma expressão simples:

$$\boxed{T \approx 16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-2\alpha a}}$$

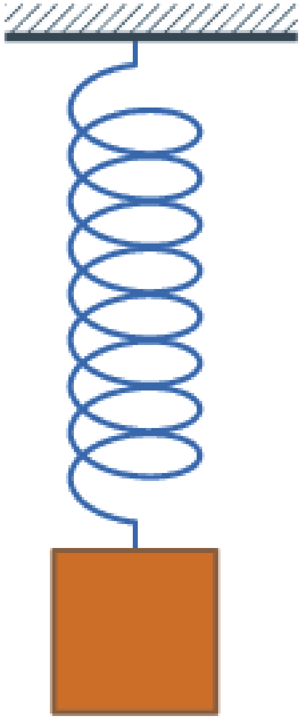
$$\alpha^2 = \frac{2m\left(V_0 - E\right)}{\hbar^2}$$

Esboço da densidade de probabilidade para uma barreira de potencial





O Oscilador Harmônico



Oscilador Harmônico Simples (OHS) é um dos sistemas mais estudados em Física Clássica e um dos mais importantes. Uma realização experimental do OHS é um sistema "massa-mola", sob uma força restauradora:

$$F = -kx$$

E uma energia potencial dada por:

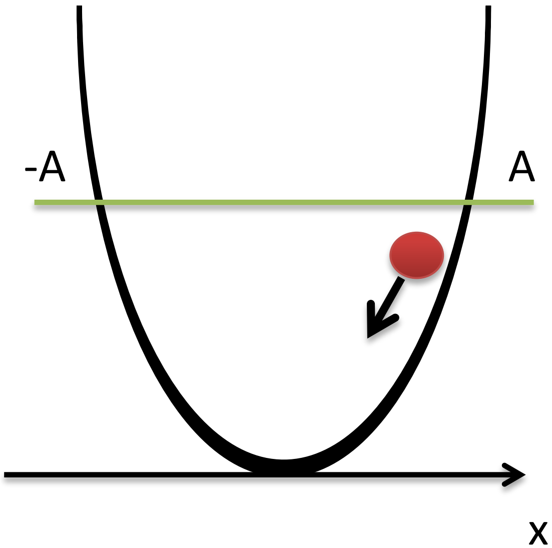
$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

As soluções da equação do movimento de Newton são funções x(t) que oscilam no tempo com a frequencia natural do oscilador:

$$w = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

A importância do OHS na Física Clássica vai muito além do sistema massa-mola. Oscilações Harmônicas surgem em uma imensa variedade de sistemas: pêndulos, fluídos, circuitos eletromagnéticos, modelagem biológica, etc.

Oscilador Harmonico Clássico



Para um oscilador harmonico clássico o potencial pode ser calculado como:

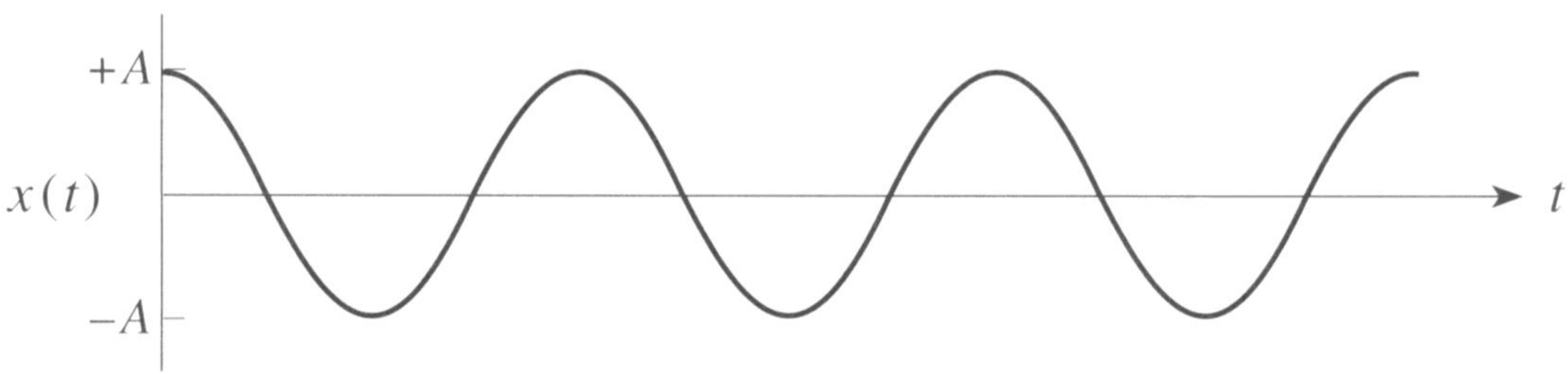
$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

Digamos que esta partícula tenha energia suficiente para chegar ao ponto de retorno A, de forma que podemos escrever:

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2A^2$$

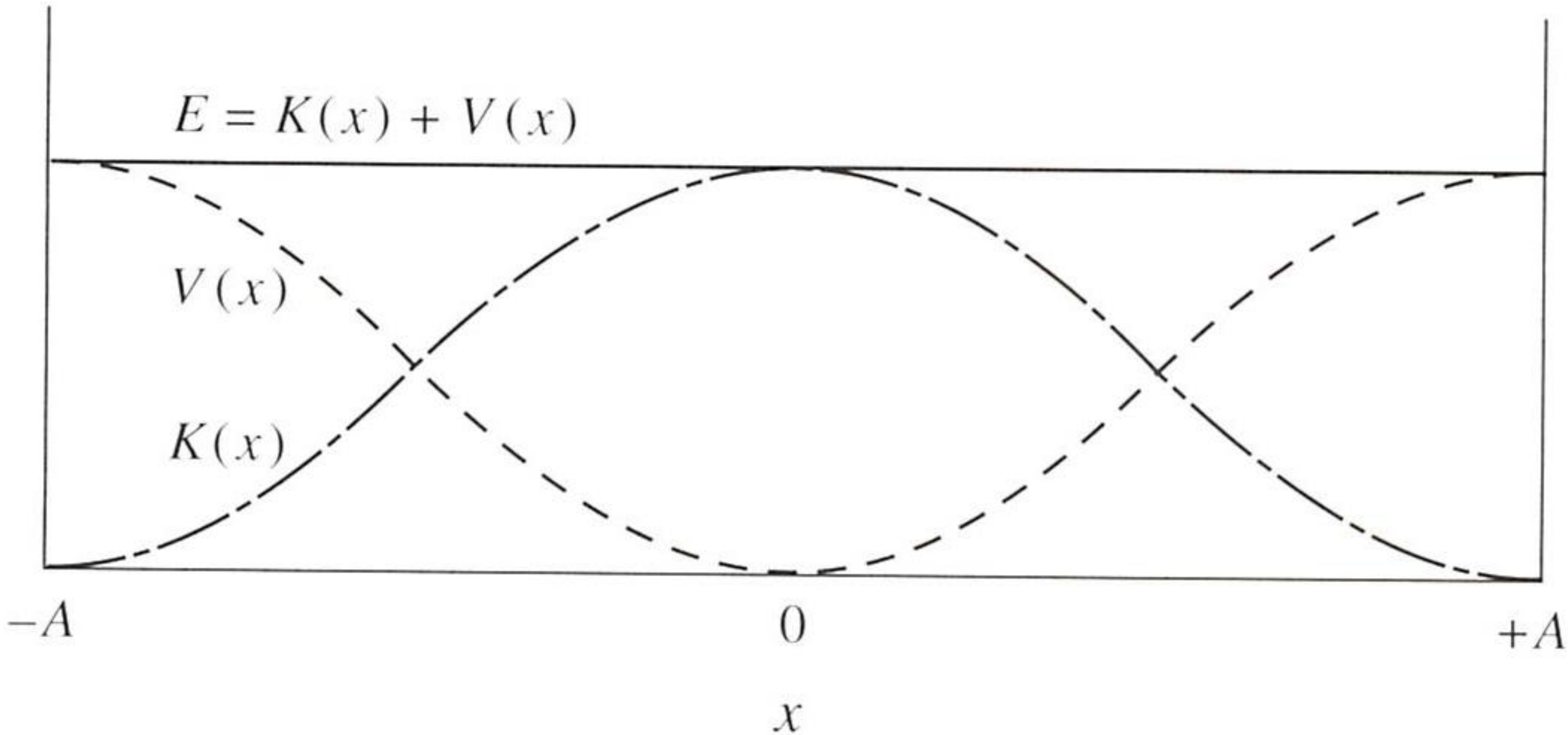
Contudo, a energia total em qualquer ponto da trajetória pode ser escrita como:

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = E$$



Energia em um oscilador harmônico

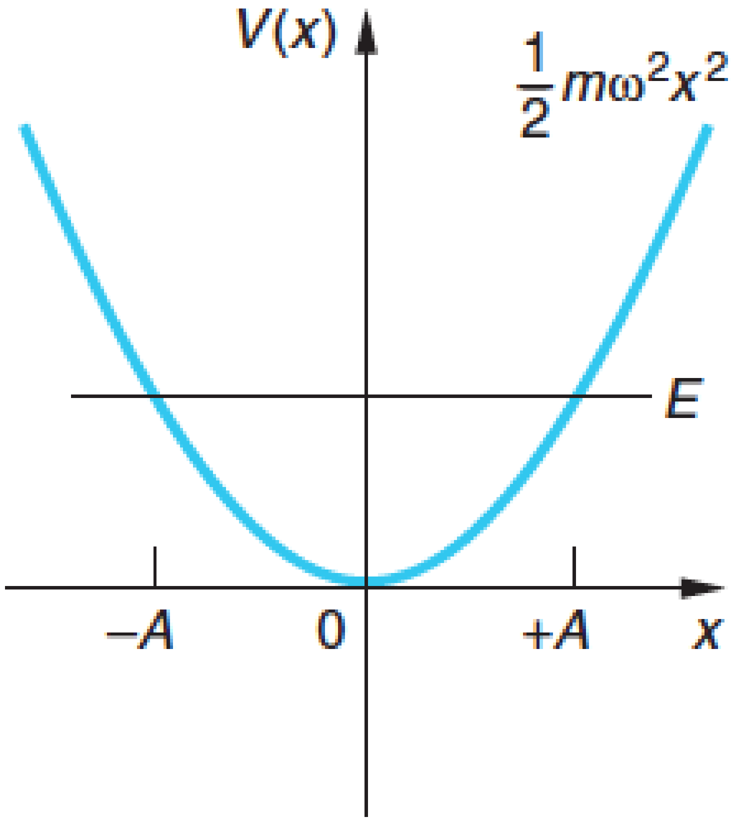
A energia do sistema é sempre conservada!!!



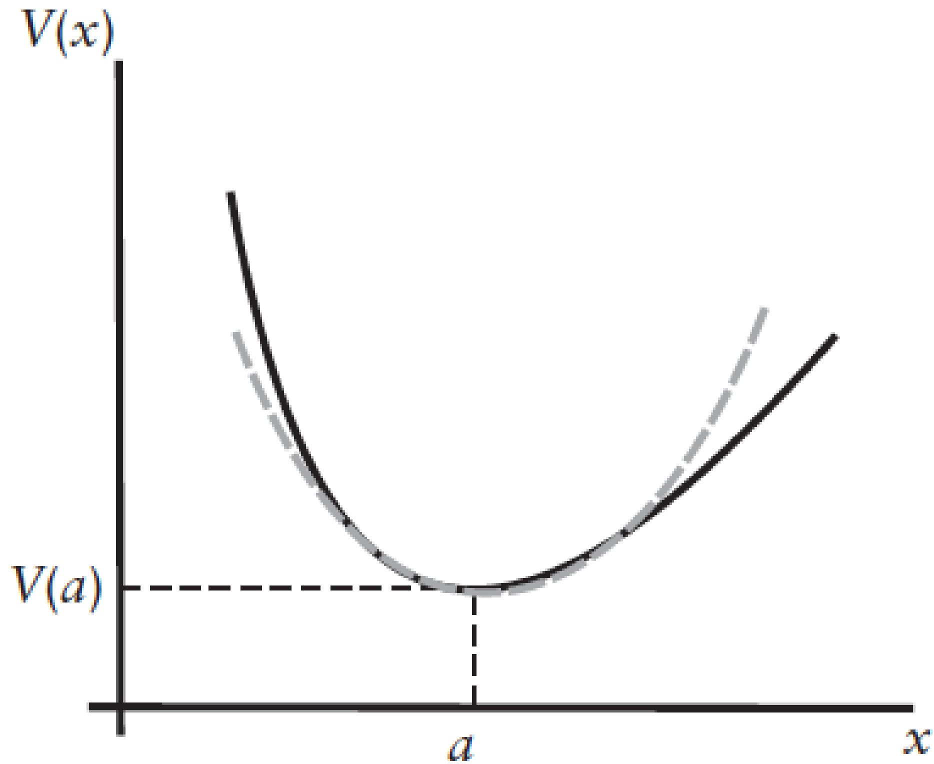
Um sistema “Massa-Mola” Quântico é representado por uma partícula sob um potência do tipo:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

Assim como na Física Clássica, o Oscilador Harmônico Simples tem grande importância em Física Quântica.



Potencial de Oscilador Harmônico



Um potencial qualquer **aproximado** por um Oscilador Harmônico

Como o potencial V(x) independe do tempo, podemos escrever a equação de Schrodinger para a posição como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}y(x)+\frac{1}{2}mw^2x^2y(x)=Ey(x)$$

A solução exata desta equação pode ser obtida com recursos matemáticos que não fazem parte do escopo deste curso. Entretanto, podemos estudar o tipo de solução que satisfaz a equação.
Primeiramente, devido a simetria do potencial do oscilador harmônico, esperamos que as soluções possuam paridade muito bem definida:

$$|\psi(-x)|^2 = |\psi(x)|^2$$

Além disso, se consideramos que a partícula possua uma energia E definida, esperamos que para o caso em que a partícula esteja além do ponto de retorno, a função de onda decaia exponencialmente, pois V(x) > E, ou seja, comportamento similar a função de onda de uma partícula em um poço finito.

Principio do “maximo otimismo”: Vamos considerar uma solução do tipo:

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$$

(educated guess)

Derivando a função chute e substituindo na equação de Schrodinger, obtemos que essa função satisfaz a equação de Schrodinger para a condição

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

E também resulta que a energia deste estado é dada por:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

A função gaussiana é uma solução do oscilador harmonico quantico. De fato, esta é a solução de energia mais baixa do oscilador harmonico e, portanto, seu estado fundamental e a energia obtida é a energia de ponto zero.

Para se encontrar a constante A devemos aplicar a condição de normalização.

Para nomalizar a função de onda, precisamos resolver a integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2}\, dx = ?$$

Um caminho para resolver esta derivada é:

Problema dobrado é problema resolvido!

(...)

Após os cálculos no quadro negro, veremos que:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}}$$

Normalizando o estado fundamental do oscilador harmonico:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).\psi(x)dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = 1$$

O resultado dessa integral pode ser obtido como (visto em aula):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

Portanto, a normalização é dada por:

$$A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

A função de onda para o estado fundamental do oscilador harmonico é:

$$\boxed{\Psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2}}$$

De maneira geral, as soluções para o oscilador harmonico são dadas por:

$$\boxed{\psi_n(x) = C_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n(x)}$$

Onde C_n são obtidos por normalização e $H_n(x)$ são denominados **Polinômios de Hermite.** Os três primeiros estados quanticos do oscilador hamonico são dados por:

$$\psi_0(x) = A_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar} \longrightarrow E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\psi_1(x) = A_1 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x e^{-m\omega x^2/2\hbar} \longrightarrow E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\psi_2(x) = A_2\left(1 - \frac{2m\omega x^2}{\hbar}\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar} \longrightarrow E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

E assim por diante....

Um exercício para casa

Mostre por substituição direta na equação de Schordinger que as funções $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ são as soluções do **primeiro e o segundo estados excitados** do oscilador harmônico quântico e determine os seus respectivos valores de energia.

$$\psi_1(x) = A_1 x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

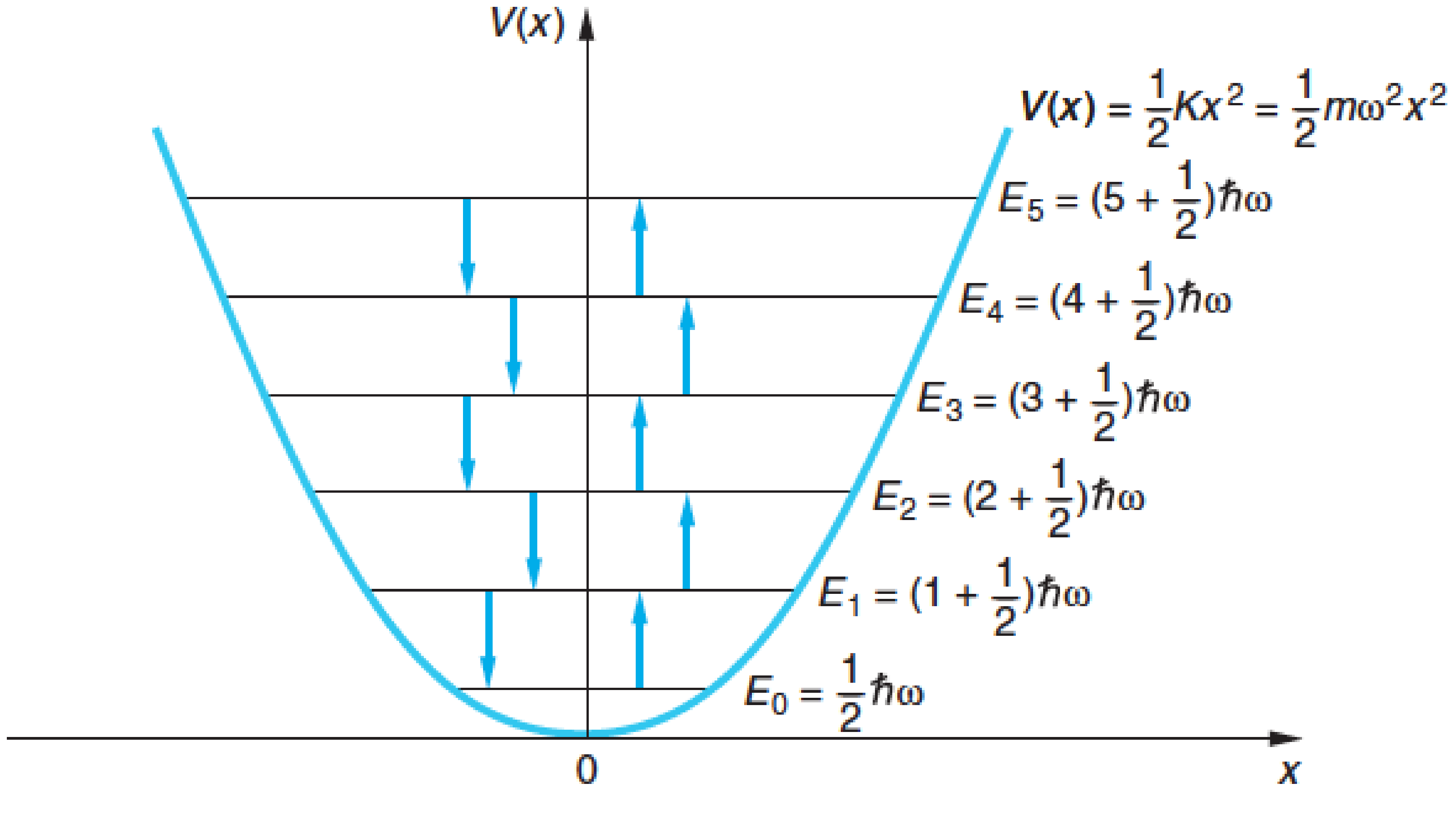
$$\psi_2(x) = A_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + A_2 x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Determine os valores das contantes A_0, A_1 e A_2 para que as funções de onda acima estejam devidamente normalizadas.

As energias no oscilador harmonico são quantizadas e dadas por:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Observe que os valores a energia dos estados aumenta de valores inteiros de hf, como foi previsto por Planck no problema do corpo negro. Naquele caso, temos uma série de osciladores harmonicos representando os modos do campo eletromagnético.

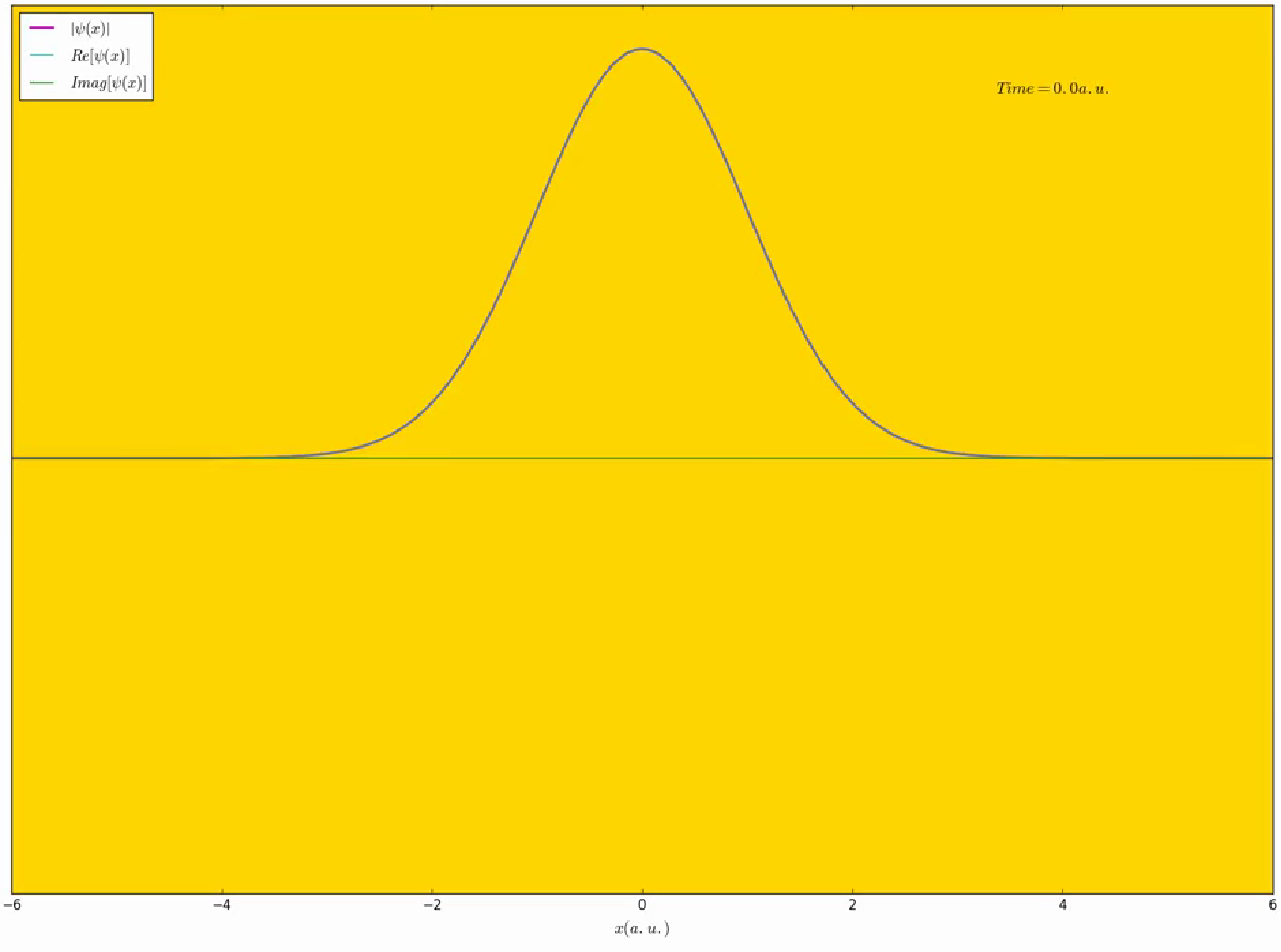


Função de onda do Oscilador Harmônico Quântico com a dependência temporal

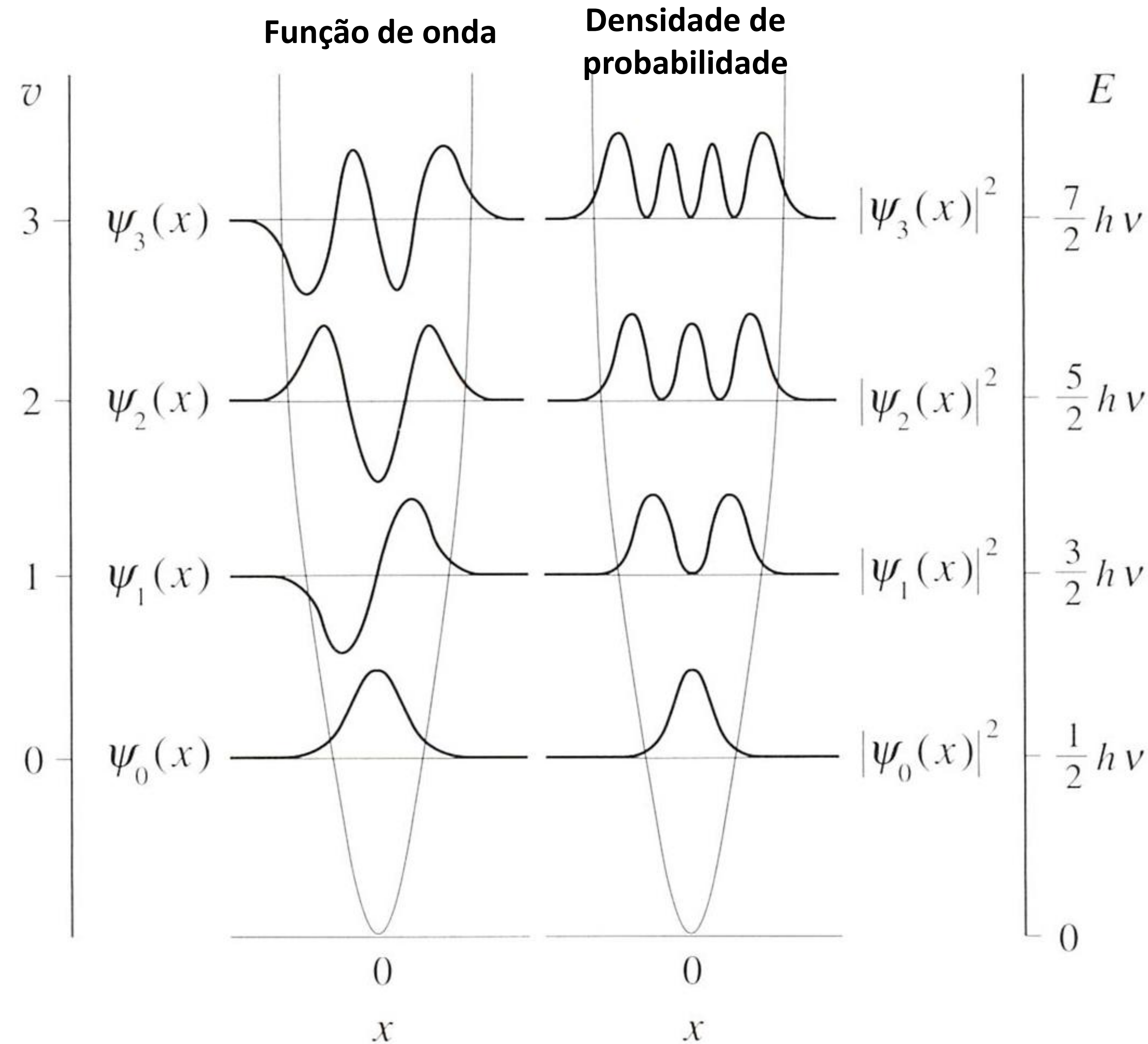
$$\boxed{\Psi(x) = C_n e^{-\left(\frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2 + i\frac{(n+1)}{2}\omega t\right)} H_n(x)}$$

Onde $H_n(x)$ são os polinômios de Hermite e C_n as constantes de normalização

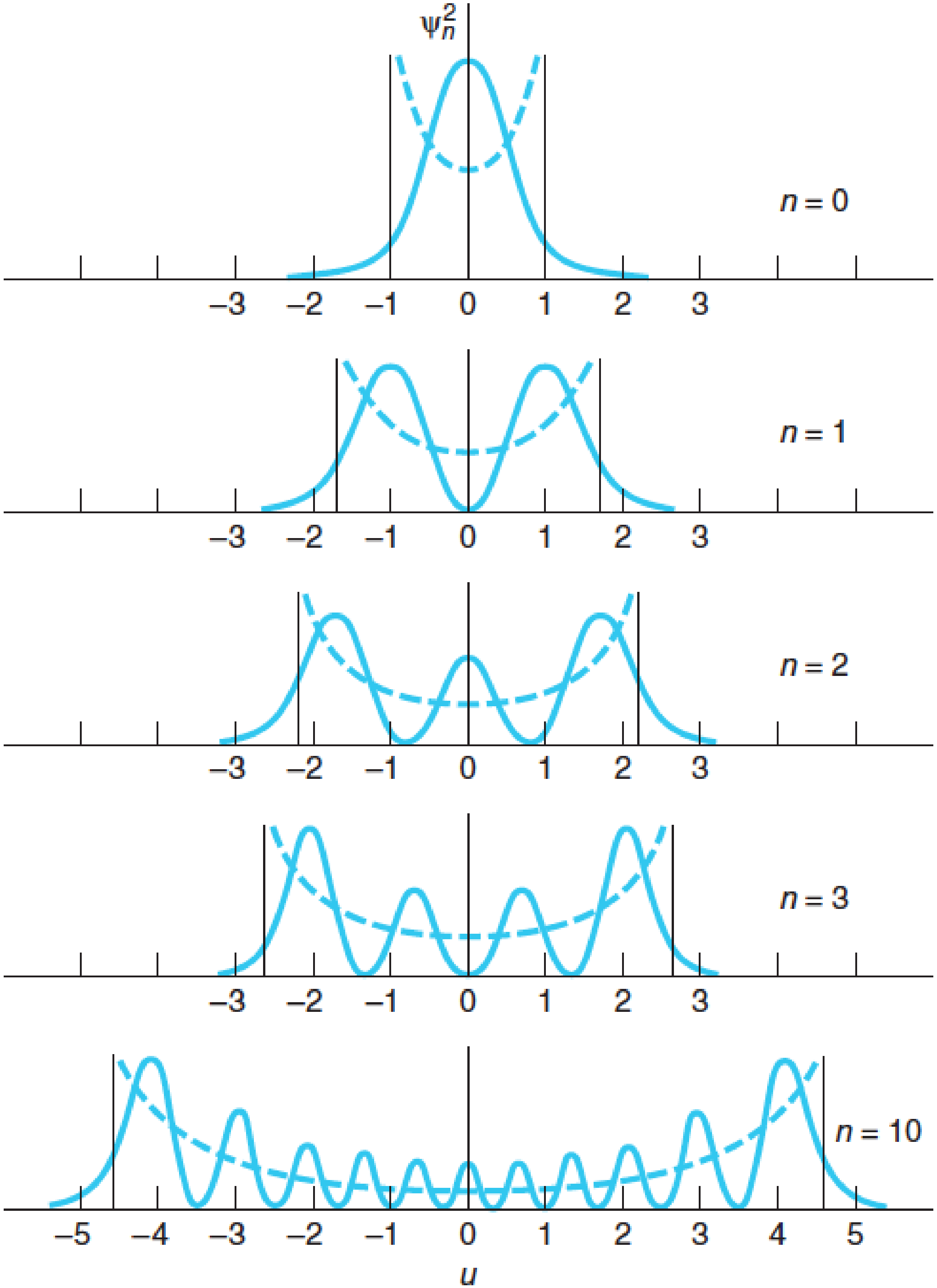
Podemos determinar para diferentes valores de n, a componente real e imaginaria da função de onda, bem como a densidade de probabilidade da função de onda. Isto pode ser visto no video a seguir para alguns valores de n.



https://www.youtube.com/watch?v=Ar9DNZGnUAE



Função de onda
Densidade de probabilidade
v
E
3
2
1
0
$\psi_3(x)$
$\psi_2(x)$
$\psi_1(x)$
$\psi_0(x)$
$|\psi_3(x)|^2$
$|\psi_2(x)|^2$
$|\psi_1(x)|^2$
$|\psi_0(x)|^2$
$\frac{7}{2}h\nu$
$\frac{5}{2}h\nu$
$\frac{3}{2}h\nu$
$\frac{1}{2}h\nu$
0
0
x
0
x



Quanto maior o n, maior a "de-localização" da partícula, ou seja, maior a região onde a na qual a partícula tem probabilidade não nula de ser encontrada.

Radiação de Corpo negro e o Oscilador Harmônico

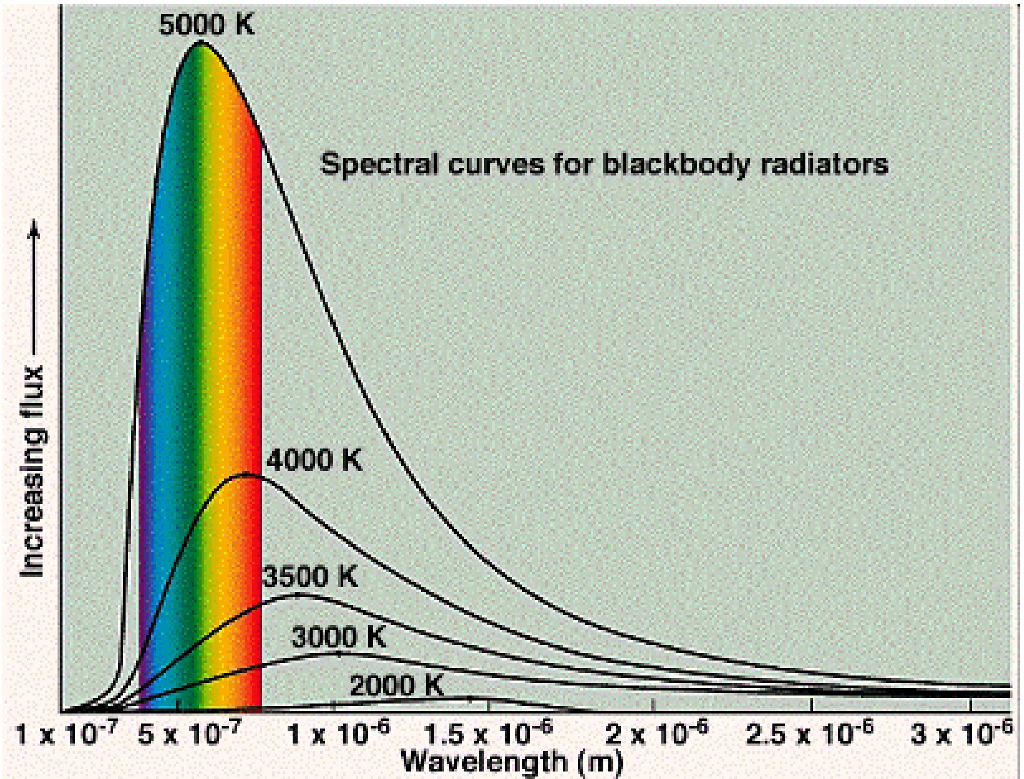
Lembre-se que o oscilador harmonico já foi usado antes para a solução do **corpo negro**.

$$E_n = nhf$$

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty E n_B(E)\, dE$$

$$\boxed{\langle E \rangle = \frac{hf}{e^{hf/kT} - 1}}$$

Planck (1858 – 1947)



O que há por vir... (Disciplina Interações Atômicas e Moleculares)

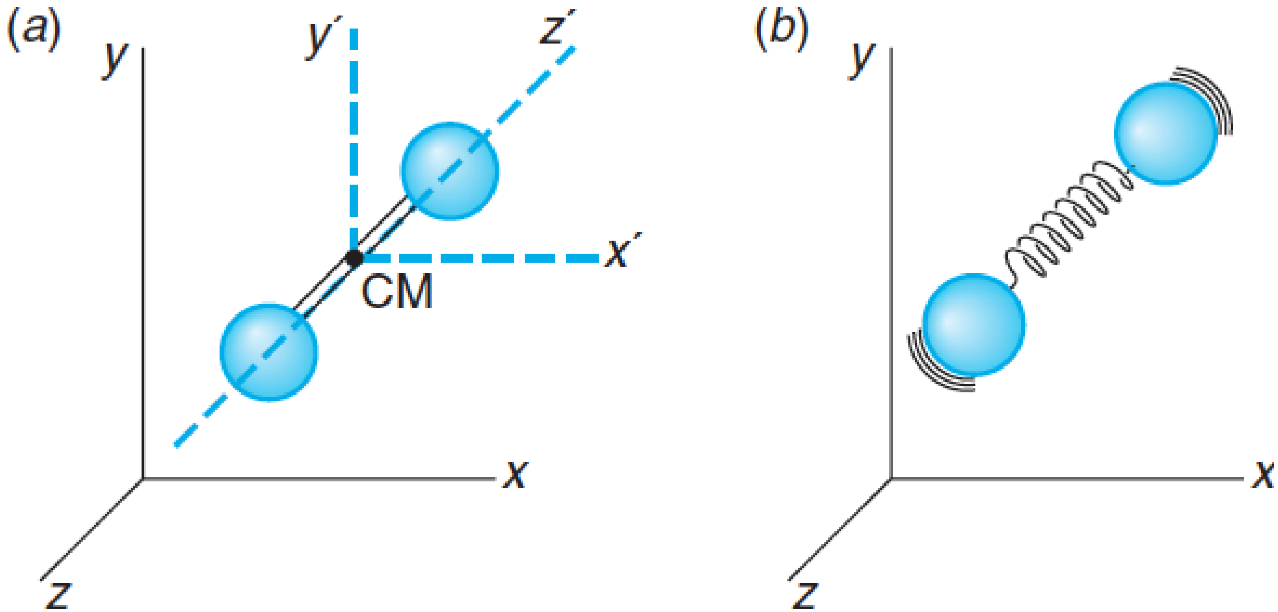


Figure 8-10 (*a*) Rigid-dumbbell model of a diatomic gas molecule that can translate along the x, y, or z axis and rotate about the x' or y' axis fixed to the center of mass. If the spheres are smooth or are points, rotation about the z' axis can be neglected. (*b*) Nonrigid-dumbbell model of a diatomic gas molecule that can translate, rotate, and vibrate.

$$\boxed{E = \tfrac{1}{2}mv_x^2 + \tfrac{1}{2}mv_y^2 + \tfrac{1}{2}mv_z^2 + \tfrac{1}{2}I_{x'}\omega_{x'}^2 + \tfrac{1}{2}I_{y'}\omega_{y'}^2}$$

Aproximação do potencial molecular por um potencial de oscilador harmonico

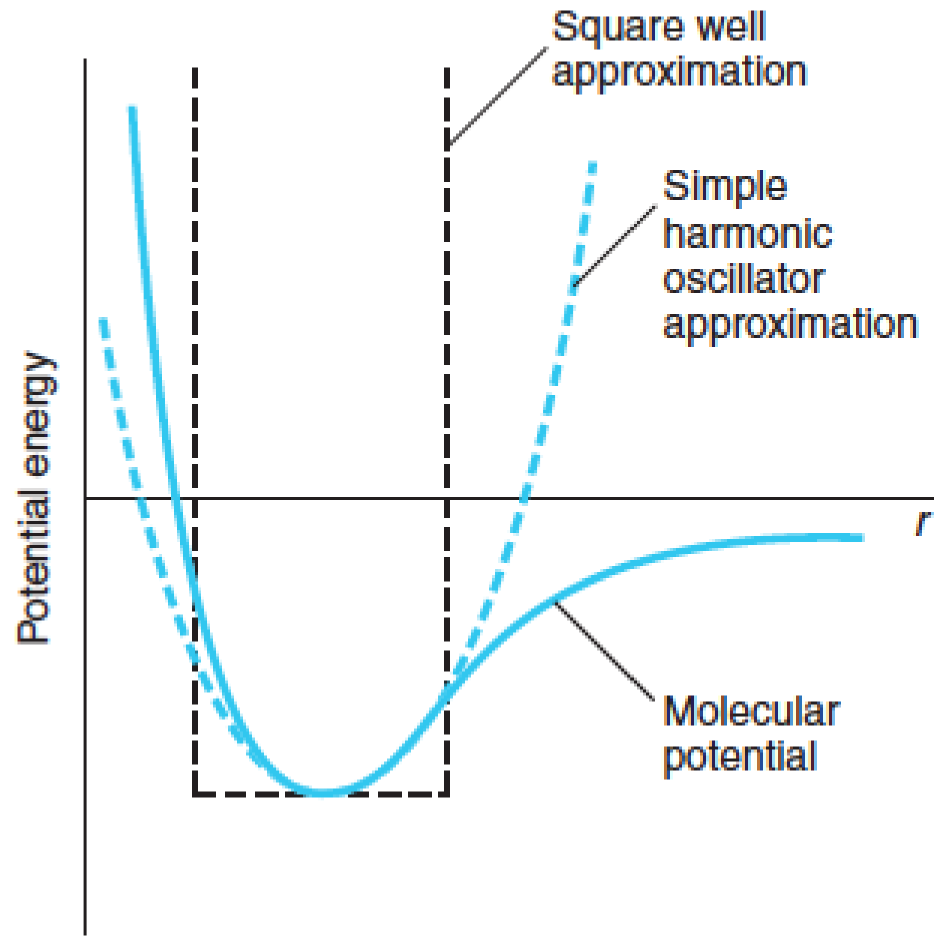
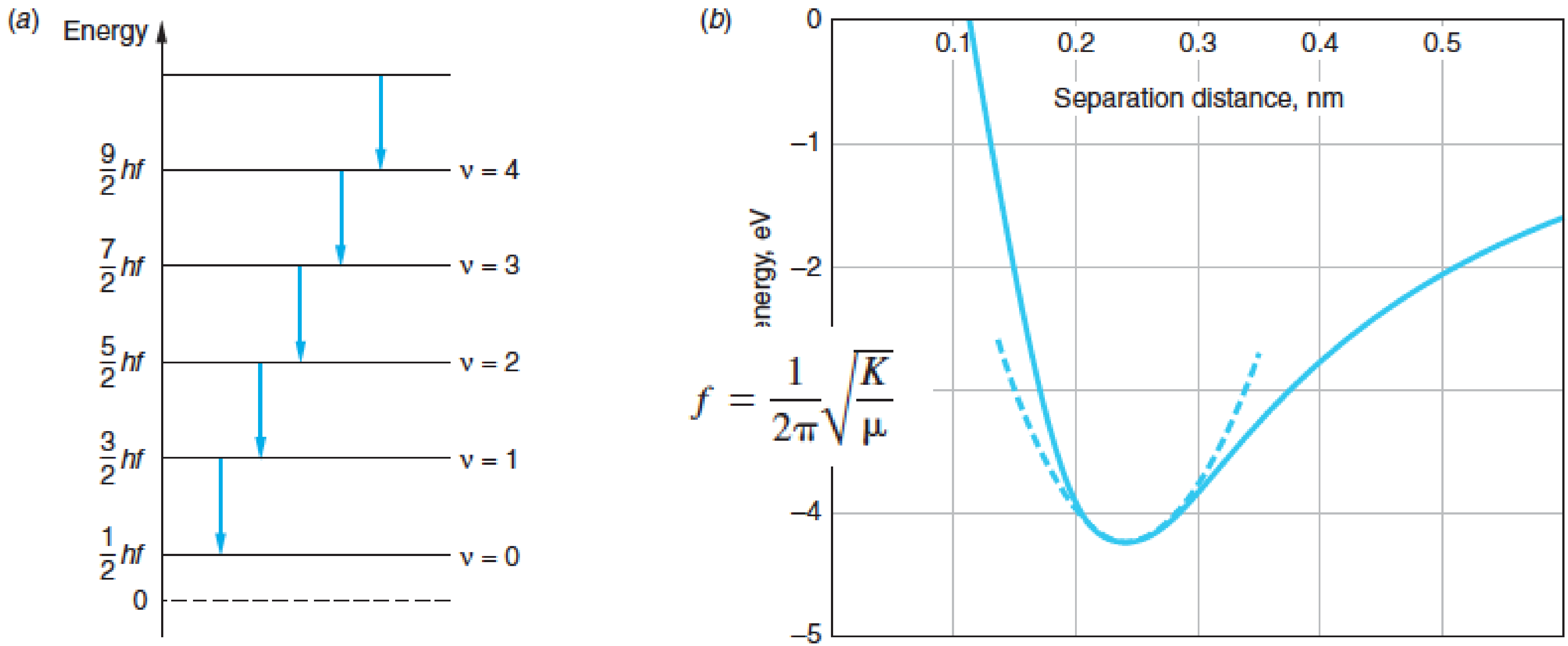


Figure 9-24 Molecular potential. The simple harmonic oscillator approximation, used to calculate the energy levels, and a square well approximation, used to estimate the order of magnitude of the energy levels, are each indicated by dashed curves.

$$\boxed{E_\nu = (\nu + 1/2)hf \qquad \nu = 0, 1, 2, 3, \ldots}$$



$$f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{K}{\mu}}$$

Figure 9-23 (*a*) The energy levels of the molecular vibrations are equally spaced in the vicinity of the equilibrium spacing of the atoms. (*b*) A harmonic oscillator potential fitted to the actual potential energy function of the NaCl molecule shown in Figure 9-2*b*.

$$\boxed{E_n = n^2\frac{h^2}{8mr_0^2} = n^2\frac{4\pi^2\hbar^2}{8mr_0^2} = n^2\frac{\pi^2}{2}\frac{\hbar^2}{mr_0^2}}$$

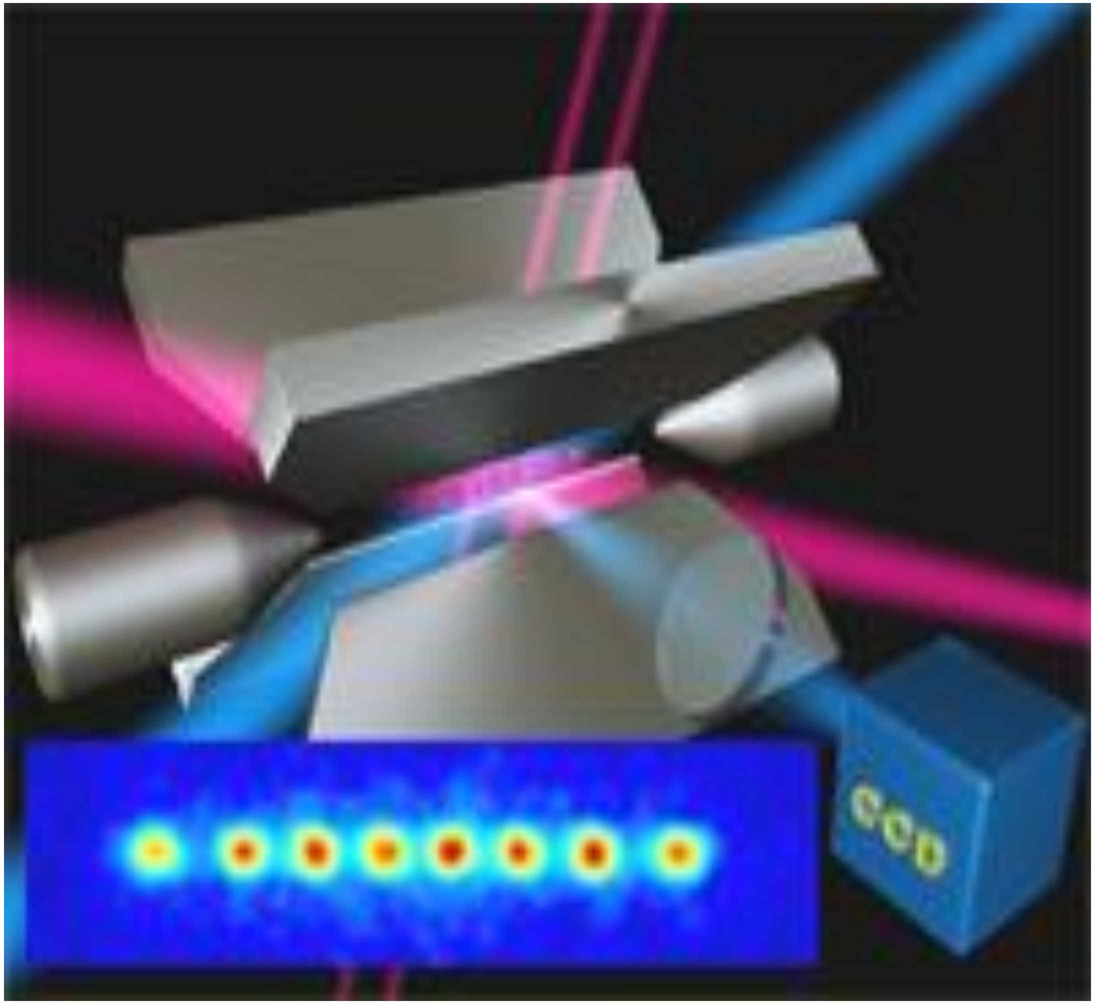
“O principal ingrediente da ***primeira revolução quâtica****, a dualidade onda-partícula, nos levou a invenções como o transistor e o laser que são as raízes de nossa* ***sociedade de informação****.*

Alain Aspect
(1947 -)

Palestra: "The future of quantum technologies: the Second quantum revolution"
https://www.youtube.com/watch?v=RBNzhVd_Yuw

Íons Aprisionados

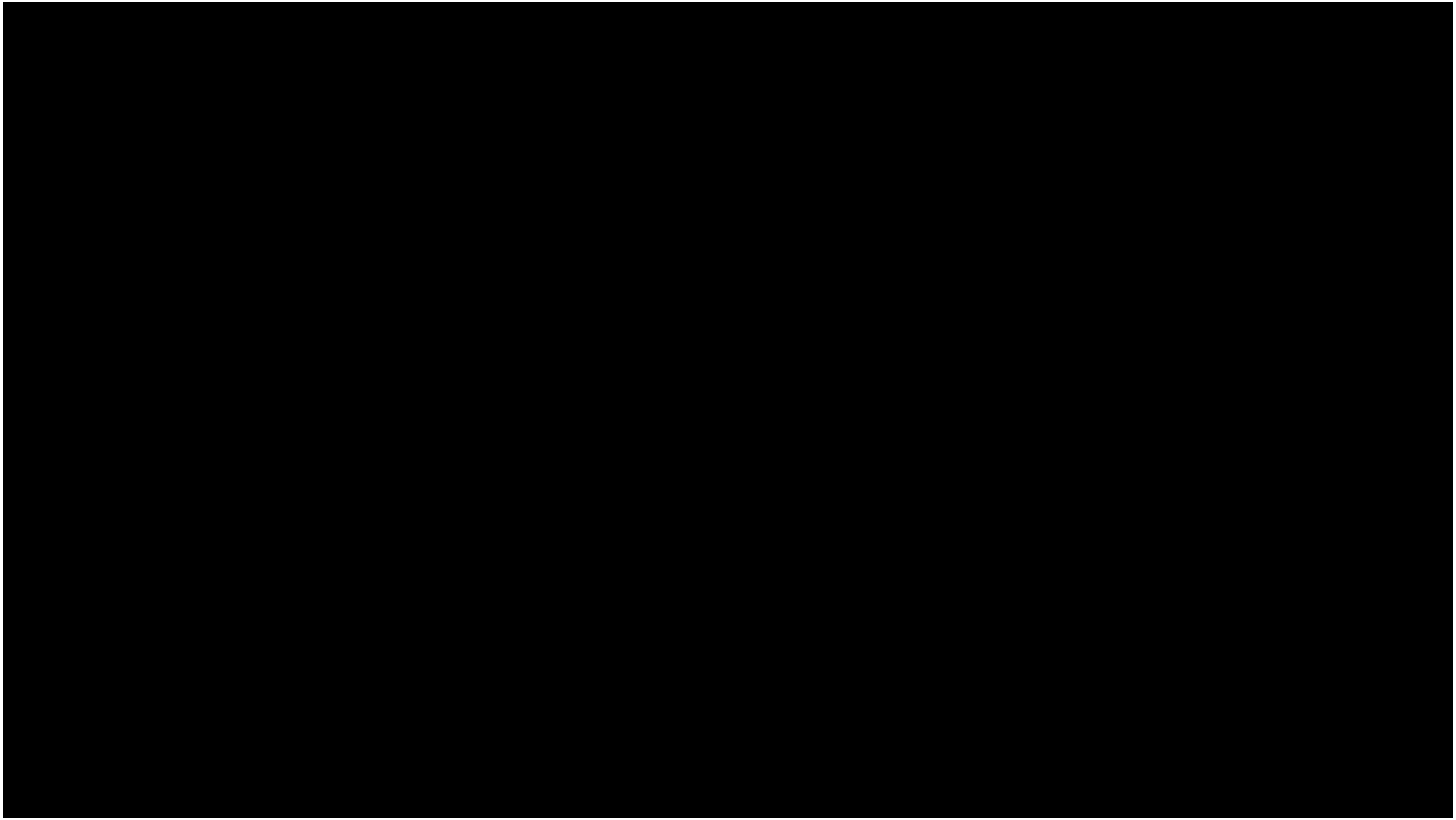
Íons são inicialmente confinados em um arranjo linear por meio de campos eletromagnéticos e com o uso de lasers os átomos são resfriados (nível de movimento dos íons é diminuído) até termos os íons em seu estado mais baixo de energia. Os íons ficam aprisionados em um potencial harmônico.



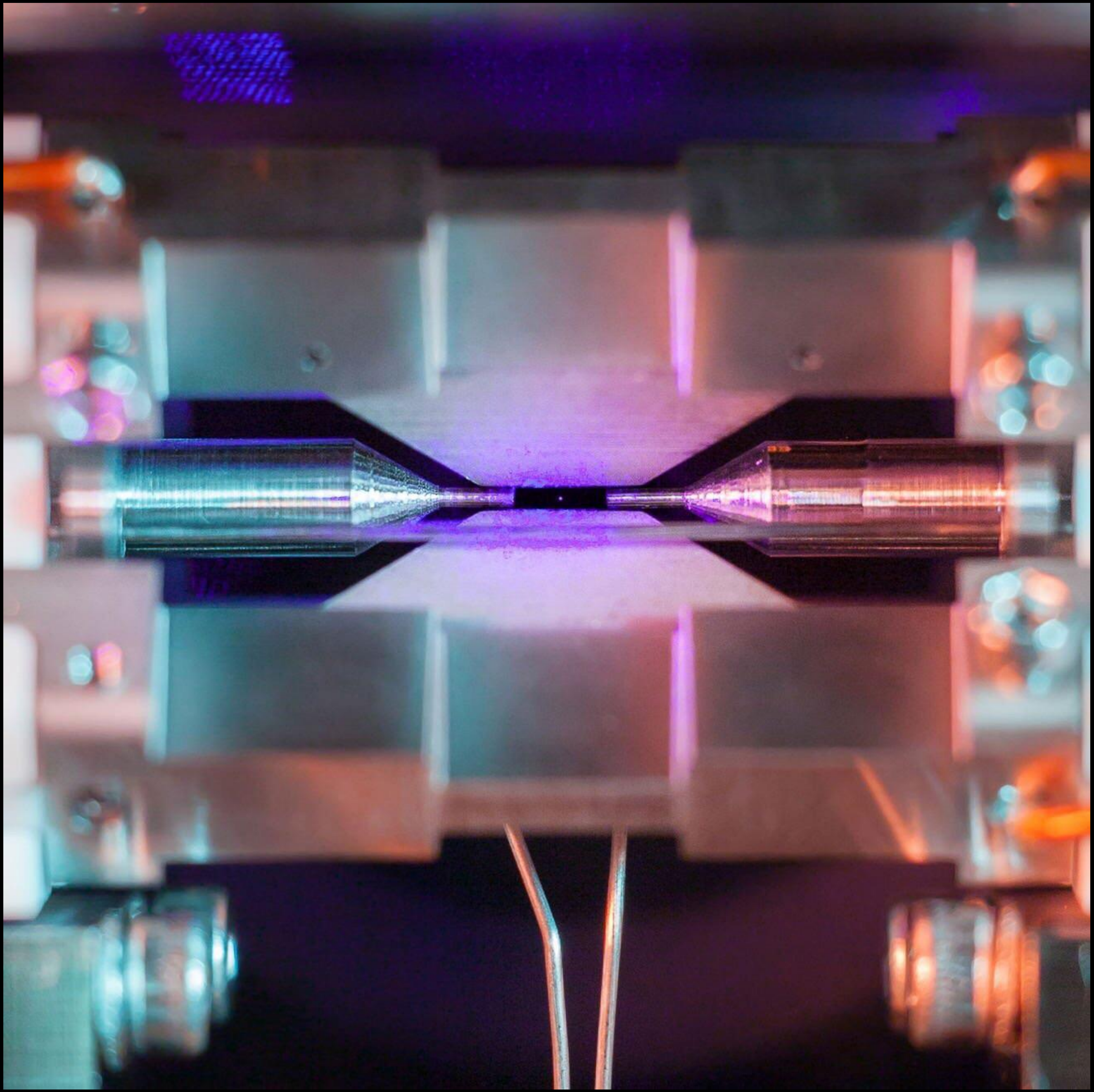
Em 2007, Serge Haroche e David Wineland foram laureados com o prêmio Nobel em física por "métodos experimentais inovadores que permitiram medir e manipular sistemas quânticos individuais.

Entre as pesquisas realizadas com íons aprisionados temos metrologia, relógios atômicos e **computação quântica**.

David Wineland explicando as armadilhas de ions



https://www.youtube.com/watch?v=nGGjzB3rR5g



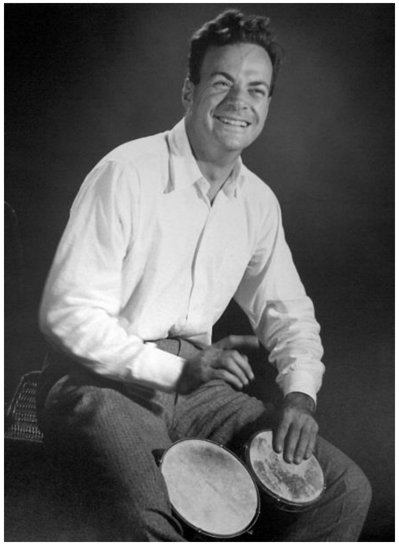
An image of a single positively-charged strontium atom, held near motionless by electric fields.
PHOTOGRAPH BY DAVID NADLINGER, UNIVERSITY OF OXFORD

Computação Quântica

Pode a física ser simulada por um computador?

"A natureza não é clássica, poxa, e se você quer fazer uma simulação da natureza, é melhor fazê-lo com a mecânica quântica, e pela amor de Deus, é um problema maravilhoso, pois não parece tão fácil."

Feynman, 1982



Algumas possíveis aplicações:

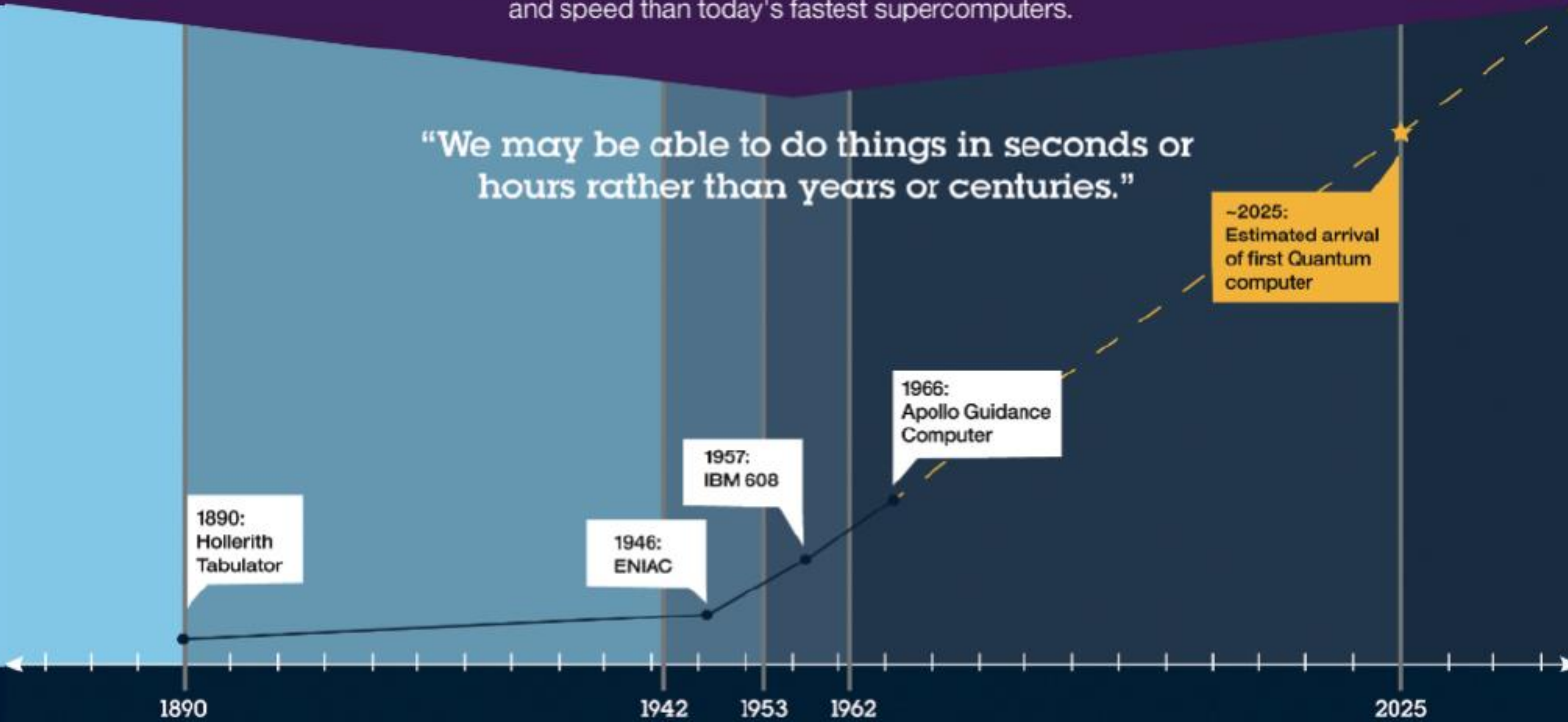
- Fatorização de números grandes;
- Criptografia;
- Busca em banco de dados;
- Super processamento paralelo;
- Simulação de sistemas quânticos;

Em 2022, estaremos completando 40 anos dessa ideia de Feynman!

THE QUANTUM LEAP

Quantum is a fundamentally new type of computer, based on the principles of quantum mechanics, that promises exponentially more power and speed than today's fastest supercomputers.

"We may be able to do things in seconds or hours rather than years or centuries."



1890–1940s
Electromechanical
Used physical relays to perform simple calculations with great speed and reliability.

1942–1950s
Vacuum Tube
Allowed control of electrical current in machines, making the leap to the digital age.

1953–1960s
Transistor
Smaller, more reliable components that used less energy and generated less heat.

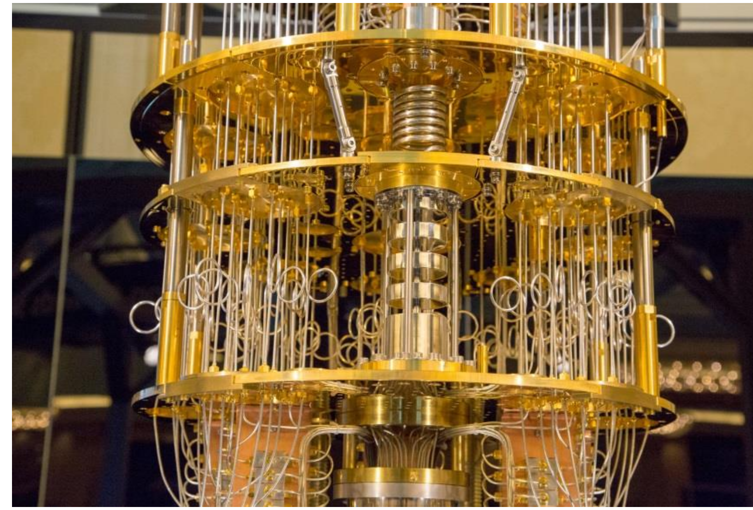
1962–2000s
Integrated Circuit
Miniaturized components on a single chip, increasing compute power and reducing cost.

~2025
Quantum
Harness quantum states to represent bits simultaneously for exponential growth in speed and power.

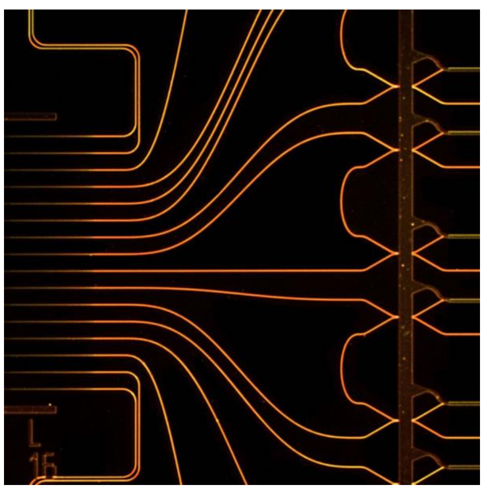
IBM

Computadores Quânticos “Comerciais”

GOOGLE



IBM

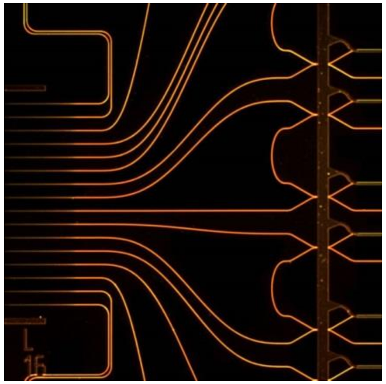


XANADU

NOVOS empreendimentos comerciais na área de computação quântica tem surgido.

Uma **SEGUNDA REVOLUÇÃO** causada pela quântica: ***TECNOLOGIAS QUÂNTICAS.***

XANADU



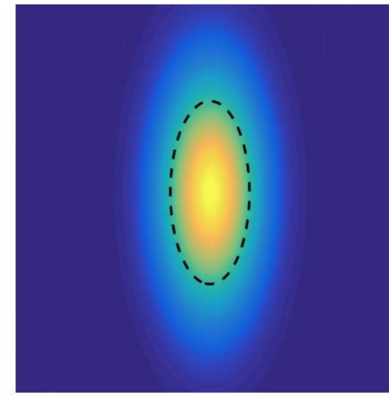
XANADU HARDWARE SOFTWARE ABOUT

Xanadu designs and integrates quantum silicon photonic chips into existing hardware to create truly full-stack quantum computing.

PLATFORM | QUANTUM RESOURCE | ROOM TEMPERATURE | QUMODES

Quantum Resource: Squeezing

"Squeezing" refers to reducing the fluctuations in a light beam. By squeezing light — changing the way it fluctuates at the quantum level — we can access a space of computational problems that no existing conventional supercomputer can tackle.



Xanadu Raises $32M Series A to Bring Photonic Quantum Computing to the Cloud

XANADU

NEWS PROVIDED BY
Xanadu →
Jun 24, 2019, 07:00 ET

SHARE THIS ARTICLE

The funding accelerates Xanadu's progress toward the release of its photonic-based quantum cloud computing platform, which will include next generation consumer applications and products not available on competing platforms.

TORONTO, June 24, 2019 /PRNewswire/ - Xanadu, the world leader in photonic quantum computing, has announced it has raised $32 million in Series A financing. OMERS Ventures led the round with participation from Georgian Partners, Radical Ventures, Real Ventures, Silicon Valley Bank and Tim Draper. The round brings Xanadu's total investment to date to $41 million.

Empresa sediada em Toronto (Canadá)

Exercício para casa ;-)

Pacote Gaussiano é um pacote de mínima incerteza

Considerando o **estado fundamental** $\Psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2}$ do oscilador Harmônico.

Determine os valores das grandezas:

$$\sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$
$$\sigma_{p_x}^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2$$

Lembrando que: $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ e $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$

Podemos mostrar que:

$$\boxed{\sigma_x{}^2 \sigma_{p_x}{}^2 = \frac{\hbar^2}{4}}$$

Isto quer dizer que o estado fundamental do oscilador harmonico é um estado quântico de mínima incerteza.

Para a solução deste problema precisamos resolver integrais do tipo:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-\alpha x^2}\, dx = ?}$$

Com n = 1, 2, 3,...

Vamos considerar dois casos:

Quando n é ímpar:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2}\, dx = 0}$$

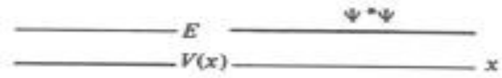
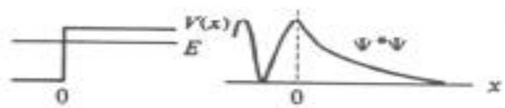
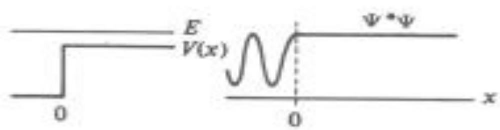
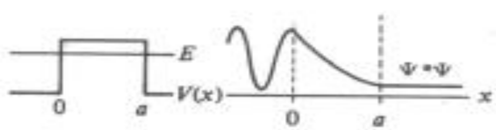
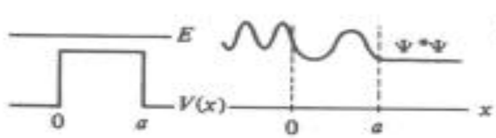
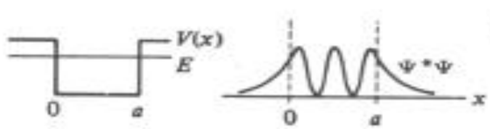
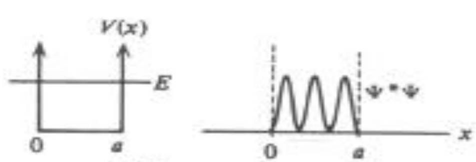
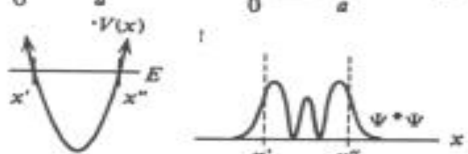
Isso pode ser obtido pela solução direta ou por argumentos de simetria!

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2}\, dx = (-1)^n \pi^{1/2} \frac{d^n}{d\alpha^n}\left(\alpha^{-1/2}\right)}$$

Isso pode ser verificado por indução. Veja nota de aula no site.

Faça as questões 8 a 16 da lista de exercícios 2

TABELA 6-2. Um Resumo dos Sistemas Estudados no Capítulo 6.

Nome do Sistema	Exemplo Físico	Energias Total e Potencial / Densidade de Probabilidade	Característica Significativa
Potencial nulo	Próton em um feixe de um cíclotron		Resultados usados para outros sistemas
Potencial degrau (energia abaixo do topo)	Elétron de condução próximo à superfície do metal		Penetração na região proibida
Potencial degrau (energia acima do topo)	Nêutron tentando escapar de um núcleo		Reflexão parcial na descontinuidade do potencial
Barreira de potencial (energia abaixo do topo)	Partícula α tentando escapar de barreira coulombiana		Efeito túnel
arreira de potencial (energia acima do topo)	Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados		Nenhuma reflexão em certas energias
ço de potencial quadrado finito	Nêutron num estado ligado no núcleo		Quantização da energia
ço de potencial quadrado infinito	Molécula estritamente confinada a uma caixa		Aproximação para um poço de potencial finito
tencial do oscilador harmônico simples	Átomo de uma molécula diatômica vibrando		Energia de ponto zero

Exemplos de potenciais em uma dimensão e suas aplicações como modelos para aplicações em problemas reais.

Todos os problemas vistos até aqui, trabalharam com a Equação de Schrodinger em 1 D

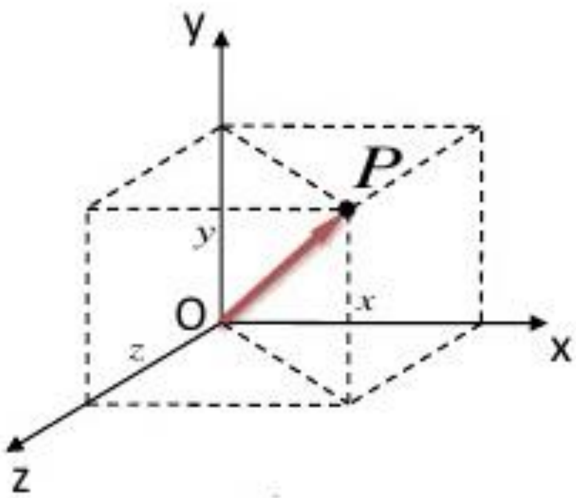
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\,x^2}\psi\left(x\right)+V\left(x\right)\psi\left(x\right)=E\,\psi\left(x\right)}$$

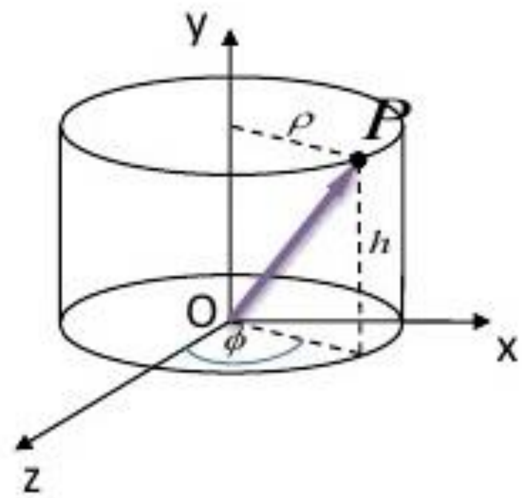
Como lidamos com potenciais em duas e três dimensões?

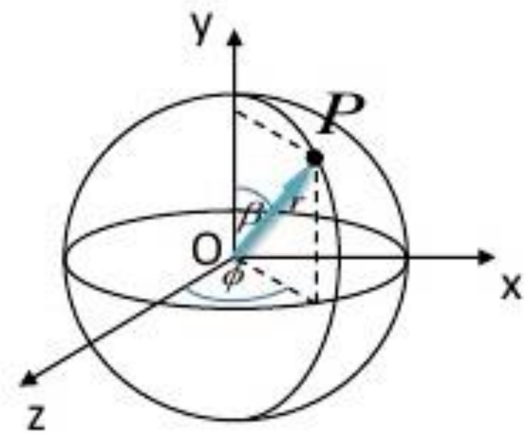
Equação de Schrodinger em duas (2D) e três dimensões (3D)

Como descrever o “espaço”?

Quando lidamos com um problema unidimensional, tudo o que temos é uma reta e, portanto, não há um questionamento sobre qual o sistema de coordenadas mais adequado a usar, porém quando passamos para 2 ou 3 dimensões, esta é uma questão relevante para a solução do problema.







Cartesianas (2D) = (x,y)

Cartesianas (3D) = (x,y,z)

Polares (2D) = (r, θ)

Cilindricas (3D) = (r,θ,z)

Polares (2D) = (r, θ)

Esféricas (3D) = (r, θ, φ)

Em geral, observamos alguma simetria do problema (“potencial”) para definir qual o sistema de coordenadas mais adequado a ser usado.

Equação de Schrodinger em 3 dimensões (coordenadas cartesianas)

Podemos escrever a equação de Schrodinger em 3 dimensões nas coordenadas cartezianas como:

$$-\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,y,z)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(x,y,z)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(x,y,z)\right)+V(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

Onde, a função de onda e o potencial dependem das três variáveis espaciais. Neste caso, já consideramos que o potencial não depende explicitamente do tempo. Portanto, para obter a solução da função de onda é necessário escrever:

$$\boxed{\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}$$

E a probabilidade de encontrar a partícula em uma certa posição (x,y,z) é dada por:

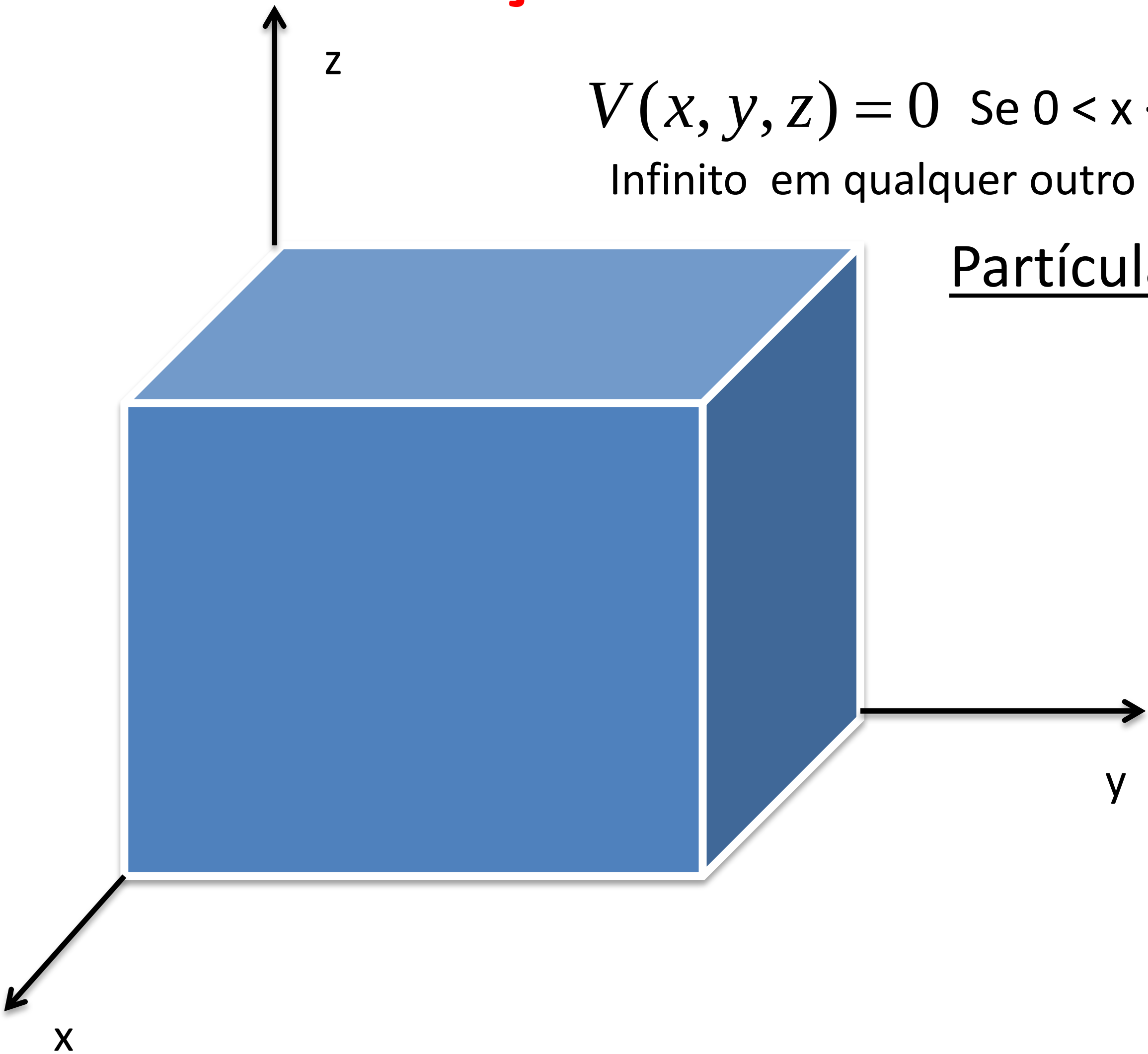
$$P(x,y,z)=\psi^*(x,y,z)\psi(x,y,z)$$

Poço Infinito em Três Dimensões

$V(x, y, z) = 0$ Se 0 < x < L e 0 < y < L e 0 < z < L

Infinito em qualquer outro caso

<u>Partícula aprisionada na caixa.</u>



Podemos utilizar o método de separação de variáveis:

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

De tal forma que em cada direção obtemos um problema independente de um poço infinito unidimensional (já resolvido em aula). A solução será dada, então, por:

$$\psi(x, y, z) = A \sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z$$

A constante A pode ser obtida por meio da normalização da função de onda intregando nas três dimensões.

$$A = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}$$

A energia da partícula será quantizada (estados confinados) e dada por:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$

$$\boxed{E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)}$$

Estados Degenerados

Degenerescência: Quando dois ou mais diferentes **estados** possuem o mesmo nível de energia. Isto é pertinente a configurações eletrônicas e níveis de energia dos elétrons, onde diferentes **estados** de ocupação possíveis (diferentes distribuições de probabilidade) podem ser relacionados por simetria.

$$L_1 = L_2 = L_3$$

Diferentes estados (funções de onda) estão associados ao mesmo valor de energia.

$E_{122} = E_{212} = E_{221} = 9E_1$ — 3 estados degenerados

$E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6E_1$ — 3 estados degenerados

$E_{111} = 3E_1$ — (estado fundamental)

Observe que, no caso da caixa cúbica, este tipo de degenerescência não ocorre se a caixa tiver os três lados de tamanhos diferentes:

$$\boxed{E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2}\right)}$$

Faça as questão 26 e 28 da lista de exercícios 2

Exercício para casa ;-)

O Oscilador Harmônico Quântico Bidimensional

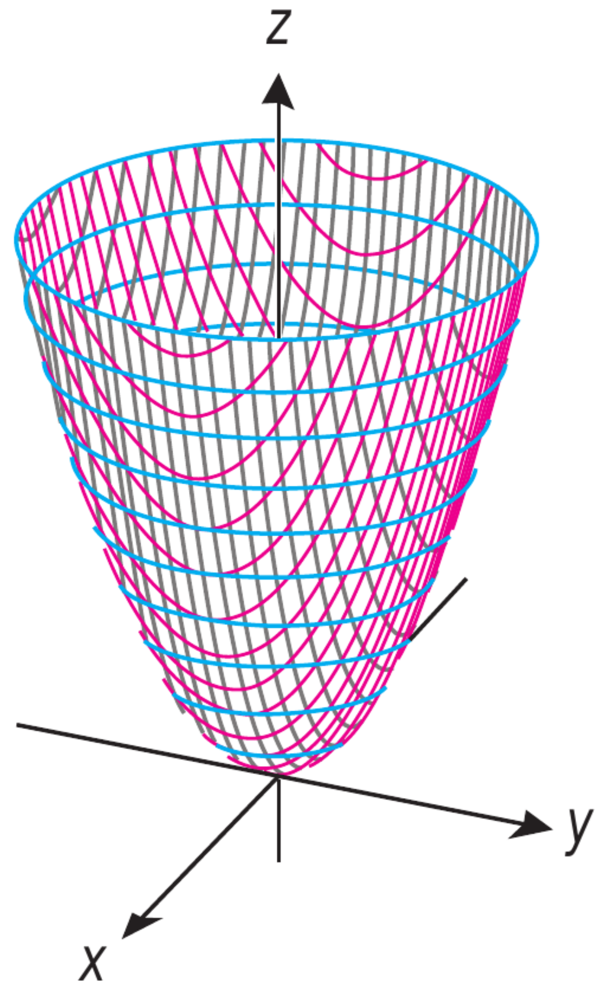
Considerando uma partícula confinada em DUAS dimensões, cujo potencial é dado por:

$$V(x) = \frac{1}{2}\mathrm{m}\left(\omega_x x^2 + \omega_y y^2\right) \text{ Para } -\infty \leq x \leq +\infty\,; \quad -\infty \leq y \leq +\infty\,;$$

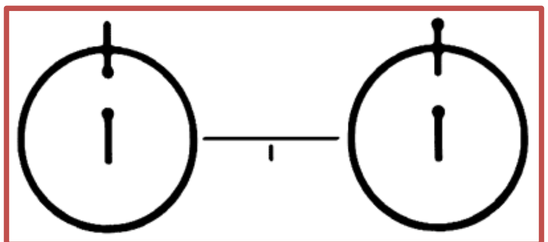
Mostre que este problema é separável e determine a solução (em coordenadas cartesianas) da equação de Schrodinger bidimensional para este potencial. Discuta sobre as autofunções e auto-energias obtidas e quais as condições das frequências para que haja degenerescências nas auto-energias?

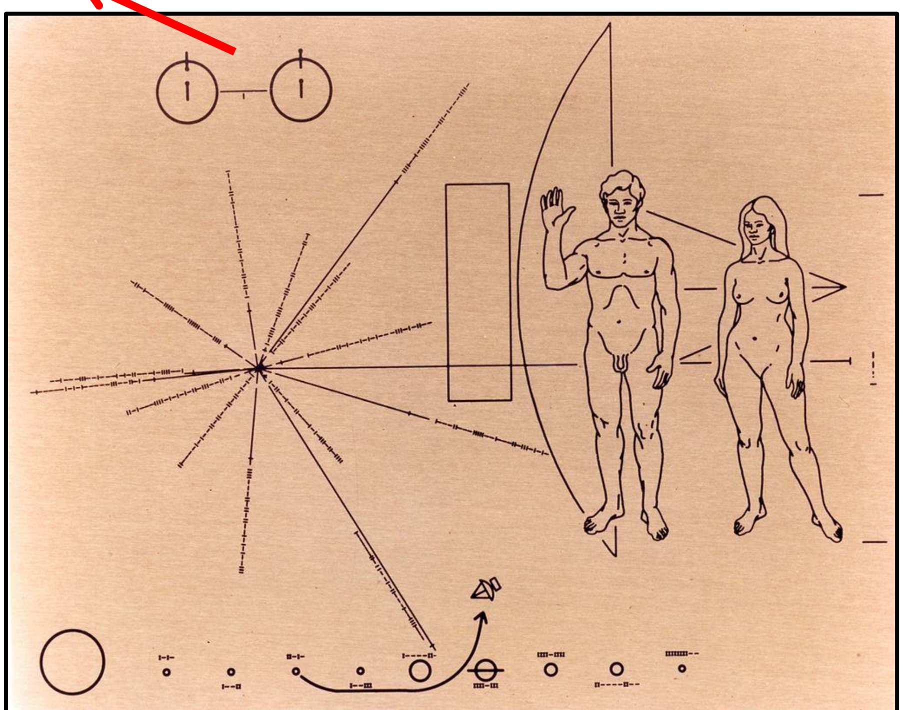
Faça agora a extensão e determine a solução para um oscilador harmônico quântico em TRES dimensões considerando:

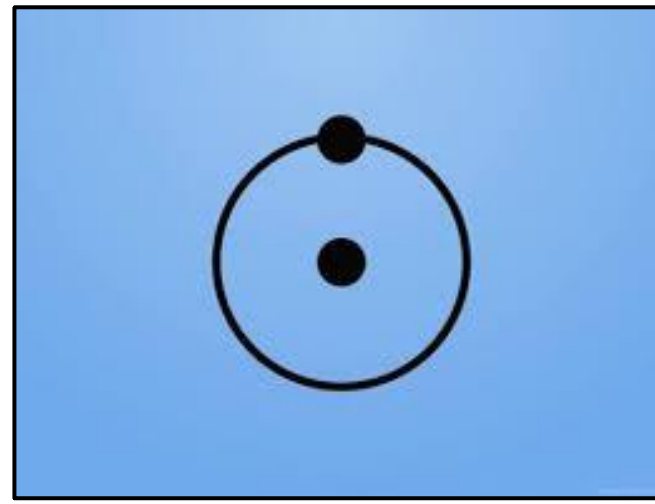
$$\boldsymbol{V(x) = \frac{1}{2}\mathrm{m}\left(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2\right)}$$

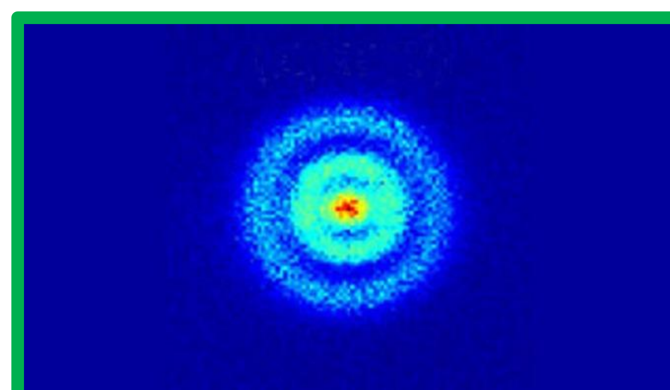


Na próxima aula, iniciaremos a resolução da equação de Schrodinger para um potencial Coulombiano de um elétron em torno de um núcleo (átomo de Hidrogênio).









Na aula de hoje (14/11/19)

- Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico.
- Armadilhas de íons e princípios de informação quântica.
- Requisitos essenciais de um computador quântico.

Na próxima aula (19/11/19)

- O átomo de Hidrogênio (coordenadas esféricas);
- Separação de variáveis;
- A quantização de Momento Angular e Energia.

Perguntas, dúvidas, comentários, aflições?

Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 1)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
1	~~24/09 (Ter)~~	~~1~~	~~Apresentação a disciplina; Evidências experimentais da teoria quântica : radiação do Corpo Negro.~~
	~~---~~	~~---~~	~~---~~
2	~~01/10 (Ter)~~	~~2~~	~~Evidências experimentais da teoria quântica: efeito foto-elétrico, efeito Compton, espectros atômicos~~
	~~03/10 (Qui)~~	~~3~~	~~Modelos atômicos, Modelo quântico de Bohr, Experimento de Franck-Hertz, Hipótese de de Broglie e ondas de matéria.~~
3	~~08/10 (Ter)~~	~~4~~	~~Revisitando ondas; interferência (fótons e elétrons) e interferômetros; dualidade onda-partícula e princípio de complementaridade; Principio de incerteza de Heisenberg.~~
	~~---~~	~~---~~	~~---~~
4	~~15/10 (Ter)~~	~~5~~	~~Interferômetros e fótons únicos, polarização da luz, postulados da física quântica e notação de Dirac~~
	~~17/10 (Qui)~~	~~6~~	~~Relação entre estados quânticos e funções de onda. Espaços discretos e contínuos na física quântica. Probabilidade e interpretações em Física Quântica. Gato de Schrodinger. e estados emaranhados.~~
5	~~22/10 (Ter)~~	~~7~~	~~Mecânica Quântica Ondulatória, Determinação eurística da Equação de Schrodinger, propridades da equação de Schrodinger e funções de ondas.~~
	---	---	---
6	**~~29/10 (Ter)~~**	**~~P1~~**	**~~Primeira Avaliação~~**
	~~31/10 (Qui)~~	~~8~~	~~Potenciais simples: poço de potencial, Espaço de estados e transições entre estados de energia; Elétrons em currais quânticos e o~~

Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 2)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
7	~~05/11 (Ter)~~	~~9~~	~~Potenciais simples: poço quadrado finito; operadores e valores médios de observáveis, pontos quânticos e suas aplicações.~~
	---	---	---
8	12/11 (Ter)	~~10~~	~~Potenciais simples: potenciais degraus, reflexão, Transmissão de Ondas, Tunelamento. Tempo de tunelamento em uma barreira (revisitando o princípio de incerteza de Heisenberg). Microscópios de tunelamento e mapeamento de átomos e moléculas.~~
	14/11 (Qui)	~~11~~	~~Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico. Armadilhas de íons e principios de informação quântica. Requisitos essenciais de um computador quântico.~~
9	19/11 (Ter)	12	Equação de Schrodinger em três dimensões: O cubo quântico (coordenadas cartesianas), O átomo de Hidrogênio (coordenadas esféricas), Separação de variáveis e a quantização de Momento Angular e Energia.
	---	---	---
10	26/11 (Ter)	13	Funções de ondas do átomo de Hidrogênio; Orbitais; Significado físico dos números quânticos atômicos. Imagens, Abstrações e Interpretações.
	28/11(Qui)	14	Introdução (noções gerais) aos Átomos de muitos elétrons, spin (quarto número quântico atômico) e tabela periódica. O fim de um começo.
11	**03/12 (Ter)**	**P2**	**Segunda Avaliação da Disciplina**
	---	---	---
12	**10/12 (Ter)**	**Psub\REC**	**Avaliação Substitutiva ou Avaliação de Recuperação**
13			
	14 a 21/9		**Lançamento de conceitos e faltas**