

Plano de aulas
Mec. Quântica Aplicada (pós-grad/SFI5774)
 [S.R.Muniz - versão 1.0 @31/01/2020, última atualização: 10/03]

Conteúdo oficial (ementa)	Conteúdo complementar
1. Operadores em mecânica quântica. 2. Postulados da mecânica quântica e equação de Schroedinger. 3. Mecânica quântica matricial. 4. Movimento linear e oscilador harmônico. 5. Momento angular e átomo de hidrogênio. 6. Teoria de perturbação e método variacional. 7. Noções de simetrias e representação de grupos 8. Estruturas atômicas e moleculares. 9. Rotações e vibrações moleculares. 10. Transições eletrônicas moleculares. 11. Propriedades elétricas e ópticas de moléculas.	C1. Teoria de perturbação dependente do tempo C2. Quantização do campo E&M C3. Formalismo de segunda quantização C4. Partículas idênticas e estatística quântica * Bose-Einstein, Fermi-Dirac, supercondutores C5. Simetria e leis de conservação Aulas práticas: 1h/semana (* <i>eventual, qdo necessário</i>) Aula prática, usando sala com computadores, para resolução de problemas com ferramentas computacionais. Permitirá explorar problemas mais interessantes e avançados. <div style="text-align: right; border: 1px solid black; padding: 2px;">[Decidir horário/local]</div>

Detalhamento das aulas e atividades semanais

Semana I: Introdução, motivação e tutoriais computacionais	
<p>Aula 1</p> <ul style="list-style-type: none"> • <u>Motivação</u>: “<i>some black clouds on the sky of Classical Physics</i>” (breve discussão histórica e sugestão de leituras complementares) <ul style="list-style-type: none"> ○ Experimentos que desafiam a Física Clássica: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Radiação de corpo negro ▪ Efeito fotoelétrico, efeito Compton ▪ Raias espectrais (séries do H, He, etc.) ▪ Difração de elétrons e dupla fenda • Transição clássico-quântico: partículas & ondas <ul style="list-style-type: none"> ○ Partículas & ondas clássicas ○ Dualidade partícula-onda e pistas da Óptica (ondulatória vs geométrica) • Revisão Mec. Clássica: <ul style="list-style-type: none"> ○ Equações de Lagrange ○ Eqs. de Hamilton 	<p>Aula 2</p> <ul style="list-style-type: none"> • Rev. Mec. Clássica (parte 2): <ul style="list-style-type: none"> ○ Parênteses de Poisson ○ Hamilton-Jacobi e a Mec. Ondulatória (conexão com Óptica ondulatória) • Introdução a ferramentas computacionais: <ul style="list-style-type: none"> ○ Jupyter <i>notebooks</i>: o que são e como usar ○ Python (exemplos & referências <i>online</i>) ○ Matplotlib (<i>plotando</i> gráficos) ○ Sympy (exemplos: cálculo, Mec. cláss. e MQ) ○ VPython (simulações e animações 3D) ○ Como submeter os <i>notebooks</i> com tarefas, listas e projetos para avaliação: <ul style="list-style-type: none"> ▪ JupyterHub ▪ sistema e-Disciplinas

Semana 2: Formulação física e matemática; Eq. de Schrödinger, soluções e métodos de resolução

Aula 3

- Formulação Física do problema (*o que estamos tentando fazer*): “the big Picture”
- Formulação matemática da MQ:
 - Eq. de Schrödinger
 - Função de onda (propriedades e interpretação física): amplitude, fase, probabilidades
 - normalização
 - densidade de corrente de probabilidade
 - observáveis e valores esperados
 - Ondas, pacotes de onda e incerteza

Aula 4

- Como resolver a Eq. de Schrödinger?
 - Método/abordagem geral para soluções:
 - Hamiltoniano independente do tempo
 - Potenciais simples (descrição geral)
 - Potenciais mais complicados (opções)
 - Hamiltoniano dependente do tempo
 - Soluções detalhadas da eq. independente do tempo (*analítica e computacional*) para partículas em potenciais simples:
 - partícula livre
 - partícula na caixa (estados ligados)
 - potencial degrau (espalhamento 1D, coef. reflexão e transmissão) e tunelamento.

Semana 3: Cont. métodos de resolução e estrutura matemática da MQ (parte I)

Aula 5

- Cont. de partíc. potenciais simples:
 - partícula (níveis energia) numa caixa finita
 - potencial quadrático (introdução geral, usando solução computacional)
 - potencial delta (discussão teórica)
- Teorema de Ehrenfest: conexão com Leis de Newton.

Aula 6

- Estrutura matemática da MQ (parte 1):
 - operadores
 - autofunções, autovalores e autoestados
 - representações
 - condições e propriedades da função de onda
 - postulados da MQ

Semana 4: cont. do formalismo matemático, operadores e transformações lineares

Aula 7

- Estrut. matemática da MQ (parte 2):
 - espaço de estados
 - espaço de Hilbert
 - espaço vetorial (linear) e propriedades
 - notação Dirac
 - vetores de base e representação matricial
 - propriedades Hermitianas (conjug. e transp.)
 - operadores Hermitiano e unitários
 - comutadores

Aula 8

- Continuação estrut. matemática da MQ (parte 3):
 - operador linear e transformações de base
 - representação de um operador
 - cálculo de valores esperados
 - autovalores e autovetores
 - transformações de similaridade
 - projetores e expansão em coeficientes
 - funções de operadores
 - generalização para espaços contínuos.

Semana 5: Fundamentos da Mecânica Quântica

Aula 9

- Revisitando os Postulados da MQ (+exemplos):
 - Postulado 1: vetor de estado
 - sistema de 2-níveis (spin 1/2)
 - Postulado 2: operadores e observáveis
 - operadores de Pauli
 - escrevendo op. como um produto externo
 - decomposição espectral
 - Postulado 3: operadores e medidas
 - medidas projetivas
 - relação de completeza

Aula 10

- Representação completa (CSCOs)
- Heisenberg vs Schroedinger (representações)
- Descrevendo sistemas compostos:
 - produto Tensorial
 - representação matricial do produto tensorial
 - produto tensorial de vetores de estados
- Operador Densidade:
 - propriedades da matriz densidade
 - op. dens. p/ est. completamente misturado

- Postulado 4: probabilidades de uma medida
 - degenerescência
- Postulado 5: estado após uma medida
 - degenerescência
- Postulado 6: evolução temporal do estado
 - operador de evolução temporal
 - representações: Schroedinger, Heisenberg e interação

- Introdução ao vetor de Bloch
 - *qubits* e esfera de Bloch (exemplo)
 - oscilação de Rabi (ilustração 3D, computacional)
 - equações ópticas de Bloch (discussão geral)

Semana 6: Mov. linear e oscilador harmônico

Aula 11

- Movimento de translação (revisitando resultados 1D)
- Mov. de pacotes de ondas (dispersão)
- Movimento translação 2D e 3D: *livre e 'caixa'*
- Tunelamento e penetração em barreiras

Aula 12

- Soluções do osc. Harmônico
 - eq. diferencial e polinômios de Hermite
 - método dos operadores
 - solução numérica (evolução temporal)
- Discussão do resultados, consequências e aplic.
 - vibrações em moléculas e sólidos

Semana 7: Spin, sistema 2-níveis (e Momento Angular)

Aula 13

- Spin
 - Stern-Gerlach e o spin do elétron
 - matrizes de Pauli
- Sistemas de 2-níveis e oscilações de Rabi

Aula 14

- Rotação e Momento angular
- Representação matricial
- Representação no espaço de coordenadas e esféricos harmônicos
- Composição (soma) de momento angular
 - coeficientes de Clebsch-Gordon

Semana 8: Átomo H e Estrutura atômica

Aula 15

- Solução do átomo de hidrogênio (3D)
 - método de separação de variáveis
- Orbitais e estrutura atômica
- Notação de estados atômicos
- O que acontece com 2 elétrons?

Aula 16

- Átomos de múltiplos elétrons
 - átomo de He e múltiplos elétrons
 - Hartree-Fock e campo médio
 - quebra degenerescência e estr. fina
 - Interação spin-órbita e estrutura hiperfina
- Orbitais e as regras de seleção

Semana 9: Est. Atômica-Molecular & Simetria

Aula 17

- Aproximação de Bohr-Oppenheimer
- Moléculas e estados/orbitais moleculares
- Estruturas moleculares e ligações químicas
- Vibrações e rotações moleculares

Aula 18

- Sólidos: cristalinos, cerâmicos e amorfos
- Introdução à teoria de bandas (estr. cristalinas)
- Vibrações quantizadas e fônons
- Simetrias: moléculas e sólidos cristalinos

Semana 10: Métodos Aproximativos

Aula 19

- Método de aproximação WKB
- Teoria de perturbação
 - Independente do tempo
 - Dependente do tempo

Aula 20

- Método variacional
 - Método de Rayleigh-Ritz
- Introdução à DFT (*density-functional theory*)

Semana 11: Quantização de campos

Aula 21

- Quantização do campo eletromagnético
- Estados de Fock (número), estado coerente, estado puro e misto
- Introdução ao formalismo quântico da interação da luz (radiação) com a matéria e os diagramas de Feynmann

Aula 22

- Formalismo de segunda quantização:
 - Fóton, fônon, plasmon, magnon, polariton
- Partículas idênticas e simetrização
 - Bósons, férmions e spin-theorem
 - Consequências da estatística quântica: Bose-Einstein e Fermi-Dirac

Semana 12: Transições eletrônicas & Espectroscopia

Aula 23

- Moléculas diatômicas e regras de seleção
- Transições vibracionais e estrutura rotacional
- Espectro eletrônico de moléculas poliatômicas
- Transições de estados excitados
 - Decaimentos radiativos e não-radiativos

Aula 24

- Espectroscopia óptica: UV-Vis, IR, Raman
 - Regras de seleção e simetrias
- Introdução à espectroscopia de Ressonância Magnética (nuclear & eletrônica)

Semana 13: Propriedades elétricas e ópticas

Aula 25

- Resposta a campos elétricos
- Polarizabilidade molecular: propriedades, espectroscopia e forças
- Propriedade elétricas de sólidos: cristais, polímeros e materiais amorfos

Aula 26

- Relação polarizabilidade e índice de refração
- Atividade óptica: dicroísmo e birrefringência
- Propriedades ópticas de sólidos: cristais, polímeros e materiais amorfos
- Interações e propriedade de óptica não-linear

Semana 14: Simetrias e Leis de Conservação

Aula 27

- Propriedades gerais de simetria
- Propriedades físicas: momento de dipolo, isomerismo e atividade óptica
- Operações, elementos e grupos de simetria
- Representação matricial de operações de simetria

Aula 28

- Relação entre simetrias da natureza e as leis de conservação da Física:
- Translação espaço e tempo (momento linear e energia), invariância de rotação (momento angular), simetrias de fase e reflexão da função de onda (conservação de carga e paridade)