

Entropia da informação: um estudo de excitações eletrônicas em sistemas quânticos confinados.

Wallas Santos Nascimento*¹, Frederico Vasconcellos Prudente*²

* Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, Brasil

Synopsis O presente trabalho tem como objetivo apresentar um tratamento para o estudo de excitações eletrônicas buscando suprir uma lacuna que se encontra ao que tange à determinação de valores experimentais. Nesse sentido apresenta-se aqui um método alternativo via entropia da informação, utilizando como exemplo de aplicações sistemas atômicos confinados.

Em 1948, com uma série de dois trabalhos, Claude Shannon deriva uma quantidade que fornece uma medida de incerteza em uma dada distribuição de probabilidade. Tal quantidade passou a ser conhecida como entropia da informação ou entropia de Shannon [1]. Inicia-se dessa forma a estruturação teórica do que posteriormente passaria a ser conhecida como Teoria Matemática da Comunicação ou Teoria da Informação.

A utilização da entropia da informação no âmbito do estudo de sistemas quânticos já consta de várias contribuições [2], onde podemos destacar, por exemplo, o estudo da localização/deslocalização de uma partícula no espaço [3].

O estudo de excitações eletrônicas guarda destaque na caracterização de como a matéria pode absorver energia, independentemente da natureza e velocidade da partícula incidente. A energia de excitação média pode ser medida experimentalmente através da determinação do chamado poder de freamento. Entretanto, a falta de uma gama de valores experimentais pode dificultar a determinação da energia média de ex-

citação. Nesse sentido vários métodos teóricos foram postos em prática para sanar essa possível lacuna [4, 5].

Em 1953, Lindhard e Sharff propuseram um modelo estatístico que ficou conhecido como modelo de aproximação local de plasma (LPA). Nesse modelo a distribuição de cargas é tratada como um gás de elétrons homogêneos, e é justamente nesse arcabouço que se dá a conexão entre entropia da informação e excitações eletrônicas [5]. O presente trabalho tem como objetivo apresentar um estudo de excitações eletrônicas utilizando o formalismo advindo da entropia da informação em sistemas atômicos confinados.

References

- [1] C. Shannon 1948 *Bell Syst. Tech. J* **27** 379; 623.
- [2] K. D. Sen (Ed.). *Statistical Complexity: Applications in Electronic Structure*. Dordrecht: Springer, 2011.
- [3] W. S. Nascimento; F. V. Prudente 2016 *Quim. Nova* **39** 757.
- [4] A. Banerjee *et al* 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 4050.
- [5] M. Hô *et al* 1998 *Phys. Rev. A* **57** 4512.

¹E-mail: wallasantos@gmail.com

²E-mail: prudente@ufba.br