Aula 10

Partículas idênticas

Princípio da exclusão de Pauli

Forças de troca no átomo de Hélio

Estados de spin de duas partículas

$$\left\{ \begin{array}{l} |\chi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\chi\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}} \left[\, |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \, \right] \\ |\chi\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right.$$

Tripleto de spin 1

Conectados pelos operadores escada

Simétricos sob a troca de partículas

$$|\chi\rangle \to |\chi\rangle$$

Singleto de spin 0

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\, |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \, \right]$$

"Aniquilado" pela escada

$$|\chi\rangle \to -|\chi\rangle$$

Antisimétrico sob a troca de partículas

Estados de spin de duas partículas

$$\begin{cases} |\chi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\chi\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\,|\uparrow\downarrow\rangle + \dfrac{1}{\sqrt{2}}\,|\downarrow\uparrow\rangle \\ |\chi\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

Coeficientes de Clebsch-Gordan

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\downarrow\uparrow\rangle$$

Estados de spin de duas partículas

$$\left\{\begin{aligned} |1\ 1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle = \chi_+^{(1)}\,\chi_+^{(2)} = |\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle\,|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle \\ |1\ 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle\,|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle\,|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle \\ |1\ -1\rangle &= |\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle\,|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle \end{aligned}\right.$$

$$|0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle\,|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle\,|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$\boxed{|s\ m_s\rangle = \sum_{m_1\,m_2} C^{s_1\,s_2}_{m_1\,m_2}\,|s_1\ m_1\rangle\,|s_2\ m_2\rangle}$$

Estados de spin de três partículas

Spin 1/2 + Spin 1/2 =

Spin 0 (singleto)

Spin 1 (tripleto)

Spin 1/2 + Spin 1/2 + Spin 1/2 =

Spin 0 + Spin 1/2 =

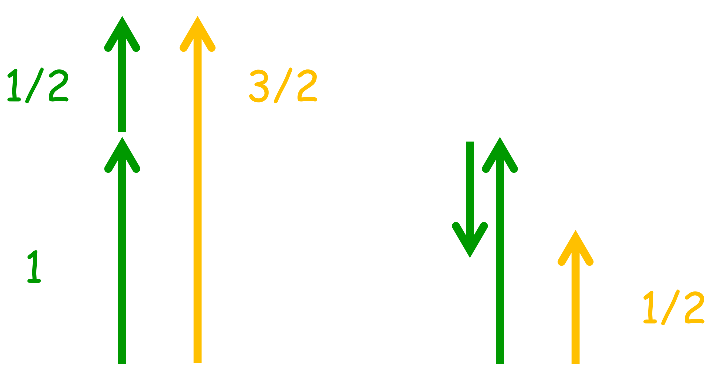
Spin 1/2

Spin 1 + Spin 1/2 =

Spin 1/2

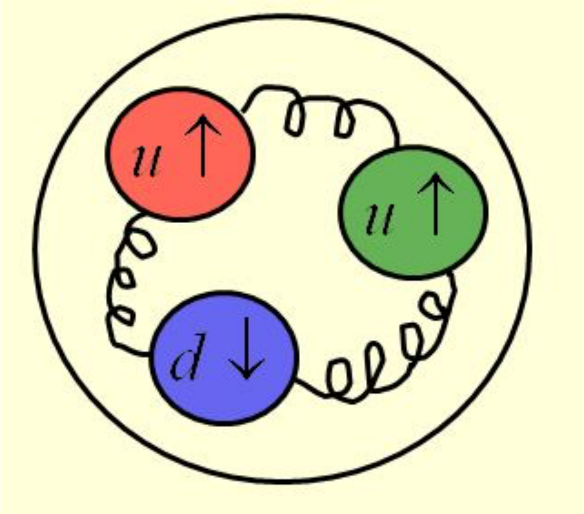
Spin 3/2

(Soma vetorial !)



Spin 1 /2 = Próton

$$\psi\,(total) = \psi_e\,(espacial)\;\;\psi_s\,(spin)$$

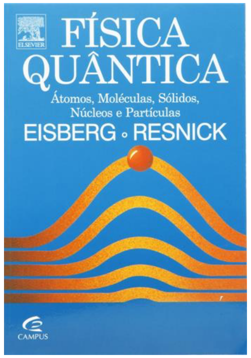


$$\psi(spin) = \frac{2}{3\sqrt{2}}(u(\uparrow)u(\uparrow)d(\downarrow)) - \frac{1}{3\sqrt{2}}(u(\uparrow)u(\downarrow)d(\uparrow)) - \frac{1}{3\sqrt{2}}(u(\downarrow)u(\uparrow)d(\uparrow)) + \cdots$$

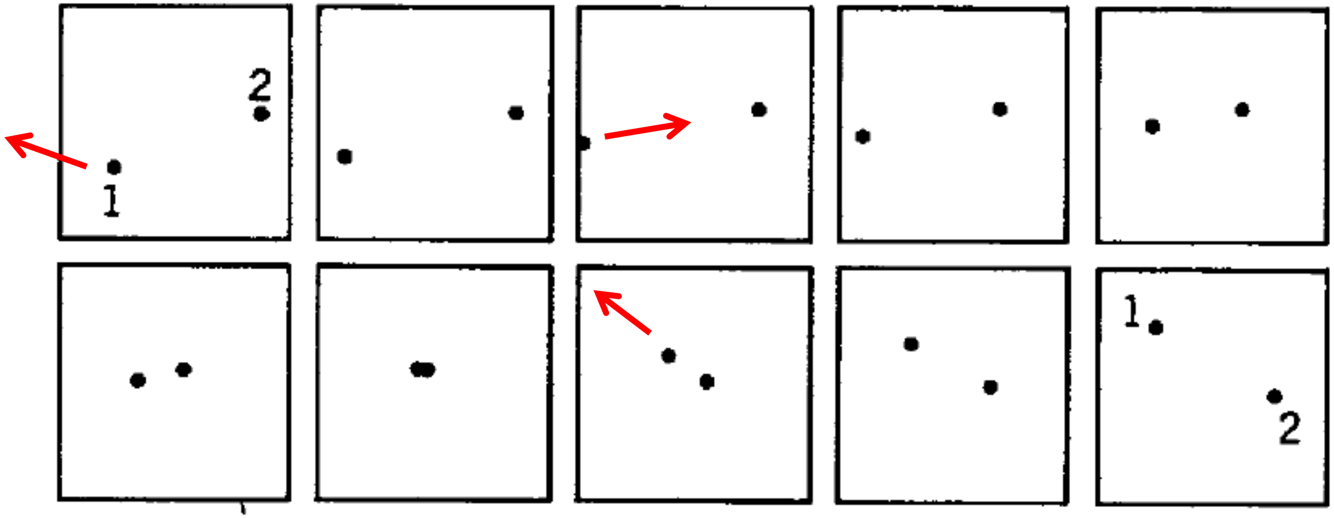
Spin 3 /2 = Delta Δ

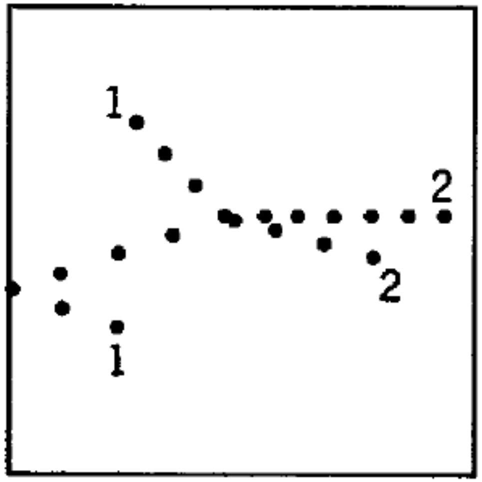
$$m_p = 938\;MeV/c^2 \qquad m_\Delta = 1232\;MeV/c^2$$

Partículas Idênticas



Capítulo 9





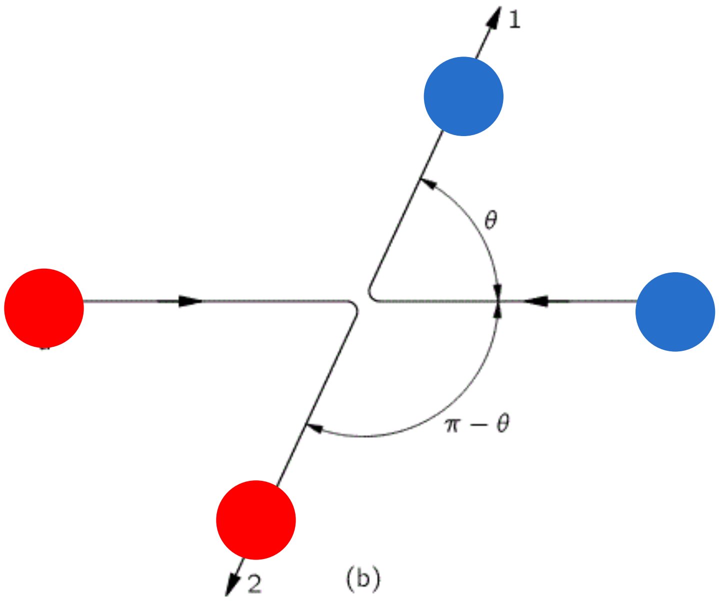
Física Clássica :

Acompanhamos no tempo
cada uma das partículas. "Bilhar"

"Distinguimos" a partícula 1 da 2

Física Clássica :

Colisão de duas partículas idênticas (dois eletrons)



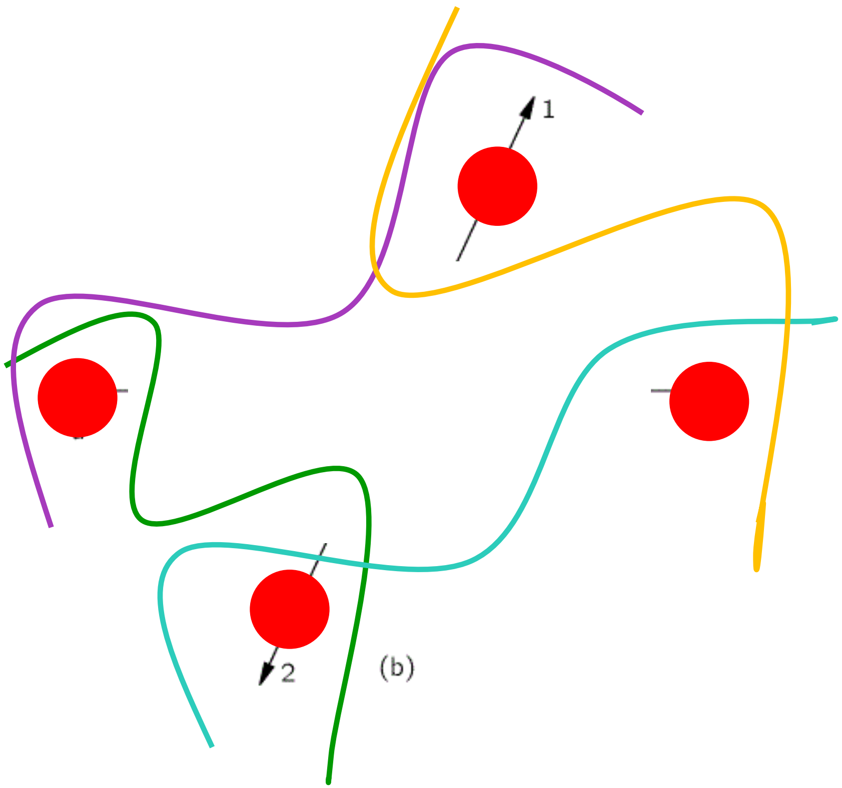
Podemos rotular ("pintar") cada partícula

Podemos definir bem as duas trajetórias

Podemos separar as duas partículas

Física Quântica :

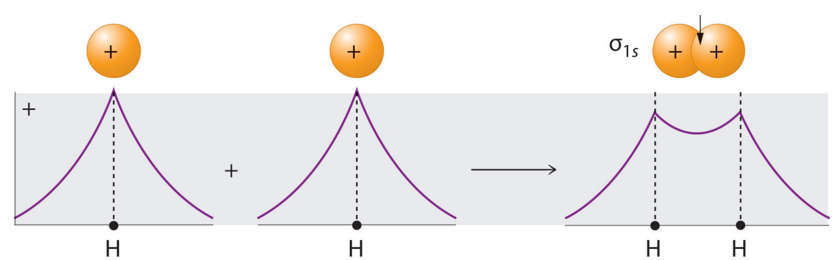
Colisão de duas partículas idênticas (dois eletrons)



~~Podemos rotular ("pintar") cada partícula~~

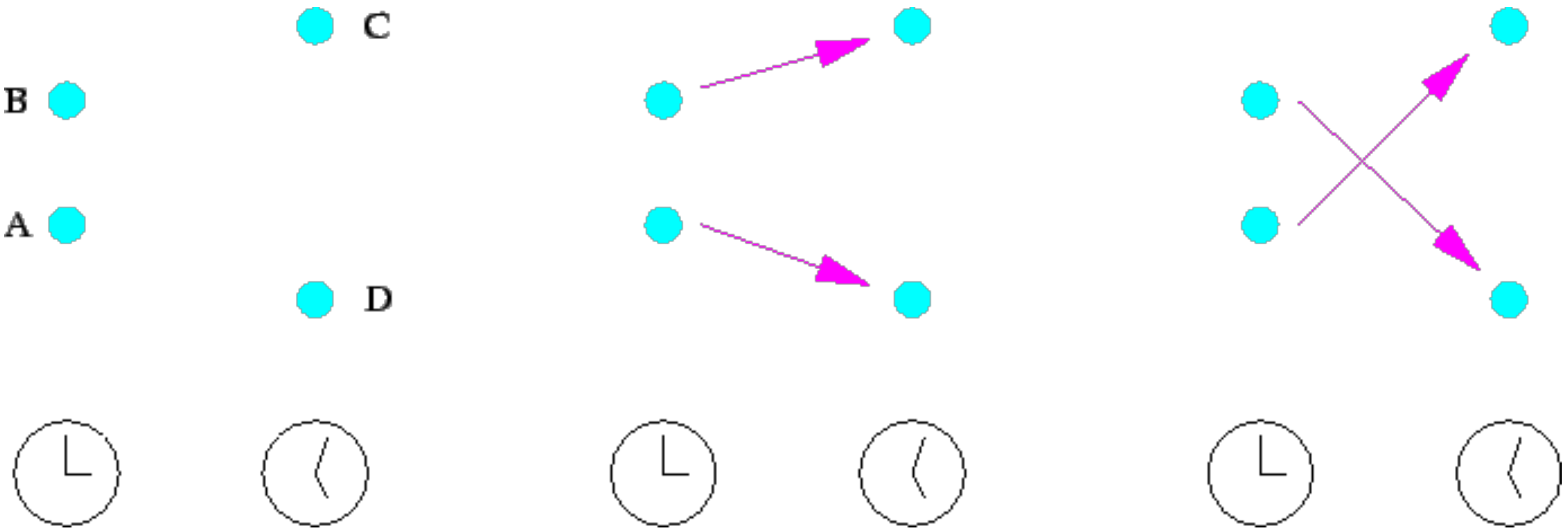
~~Podemos definir bem as duas trajetórias~~

~~Podemos separar as duas partículas~~



Física Quântica :

Evolução temporal de dois eletrons



Estamos abusando das imagens ?

Eu acho o seguinte:

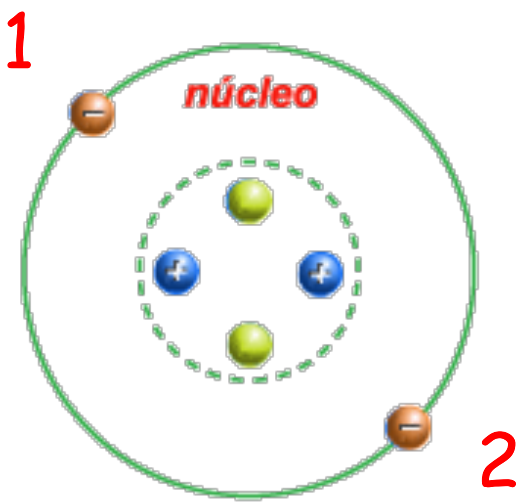
(Marco Antônio Moreira)

para dar significado ao conceito de partícula elementar (elétrons, prótons, nêutrons, quarks,...) não deve ser usado o conceito prévio de partícula como uma bolinha invisível. Partículas elementares não são bolinhas. As bolinhas nesse caso funcionam como obstáculo epistemológico.

É melhor não fazer imagem nenhuma !

(torcida do Corinthians + Barcelona + Real Madrid + ...)

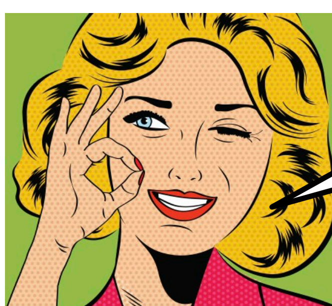
Sistemas de duas partículas independentes



átomo de hélio

1 e 2 não interagem !

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)$$



Produto é solução da ESIT !

Função de onda de uma partícula

$$\psi_{\alpha}(x_1, y_1, z_1) = \psi_{\underbrace{n\,,\,l\,,\,m}_{\text{números quânticos espaciais}}\,,\,m_s}(x_1, y_1, z_1)$$

número quântico de spin

$$\psi_{\alpha}(x_1, y_1, z_1) = \psi_{\alpha}(1)$$

$$\psi_{\beta}(x_2, y_2, z_2) = \psi_{\beta}(2)$$

$$\psi_T = \psi_{\alpha}(1)\,\psi_{\beta}(2)$$

$$\psi_{\beta}(x_1, y_1, z_1) = \psi_{\beta}(1)$$

$$\psi_{\alpha}(x_2, y_2, z_2) = \psi_{\alpha}(2)$$

$$\psi_T = \psi_{\beta}(1)\,\psi_{\alpha}(2)$$

Grandeza observável não deve mudar se permutarmos as coordenadas !

Densidade de probabilidade $P = \psi^* \psi$

$$\psi_T = \psi_\alpha(1)\,\psi_\beta\,(2)$$

$$\psi_T^*\,\psi_T = \psi_\alpha^*(1)\,\psi_\beta^*\,(2)\,\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta\,(2) \qquad \text{(A)}$$

Vamos fazer a permutação : $1 \rightarrow 2 \qquad 2 \rightarrow 1$

$$\psi_\alpha^*(1)\,\psi_\beta^*\,(2)\,\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta\,(2) \rightarrow \psi_\alpha^*(2)\,\psi_\beta^*\,(1)\,\psi_\alpha(2)\,\psi_\beta\,(1) \qquad \text{(B)}$$

(A) é diferente de (B) !

$$\psi_T = \psi_\alpha(1)\,\psi_\beta\,(2)$$

Não é boa !!!

Exercício: verifique que a permutação de 1 e 2 leva a uma densidade de probabilidade diferente !

$$\psi_T = \psi_\beta(1)\,\psi_\alpha\,(2)$$

$$\psi_T^*\,\psi_T = \psi_\beta^*(1)\,\psi_\alpha^*\,(2)\,\psi_\beta(1)\,\psi_\alpha\,(2)$$

Duas alternativas que funcionam:

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\,\psi_\alpha(2) \right]$$ (simétrica)

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_\alpha(1)\,\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\,\psi_\alpha(2) \right]$$ (anti-simétrica)

Fazendo a permutação : $1 \rightarrow 2 \qquad 2 \rightarrow 1$

$$\psi_S \rightarrow \psi_S \qquad\qquad \psi_S^*\,\psi_S \rightarrow \psi_S^*\,\psi_S$$

$$\psi_A \rightarrow -\psi_A \qquad\qquad \psi_A^*\,\psi_A \rightarrow \psi_A^*\,\psi_A$$

Princípio da Exclusão

Wolfgang Pauli

Versão fraca:

Em um átomo multieletrônico nunca pode haver
mais de um elétron ocupando o mesmo estado quântico !

Versão forte:

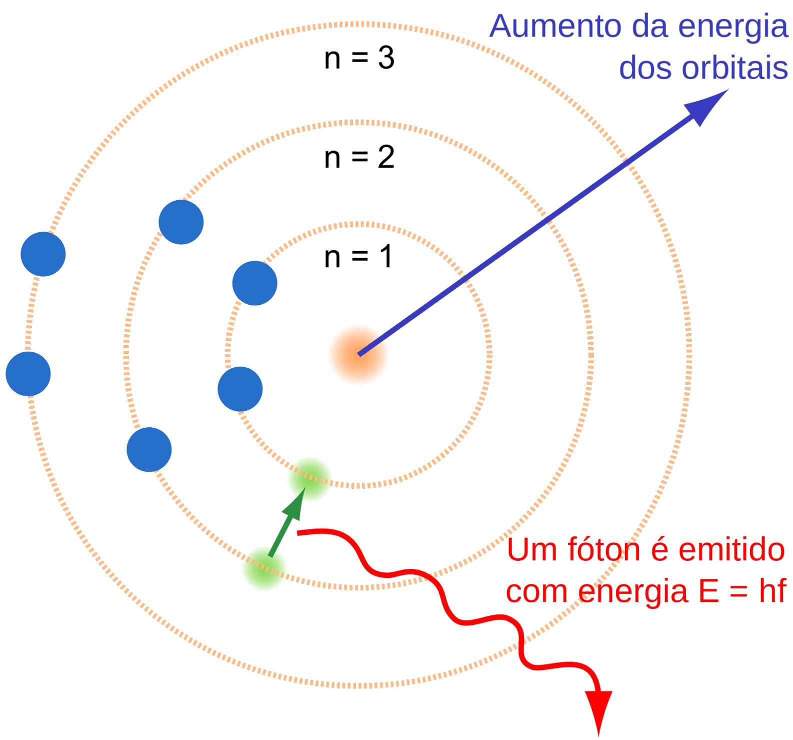
Um sistema de fermions deve ser descrito
por uma autofunção total anti-simétrica !

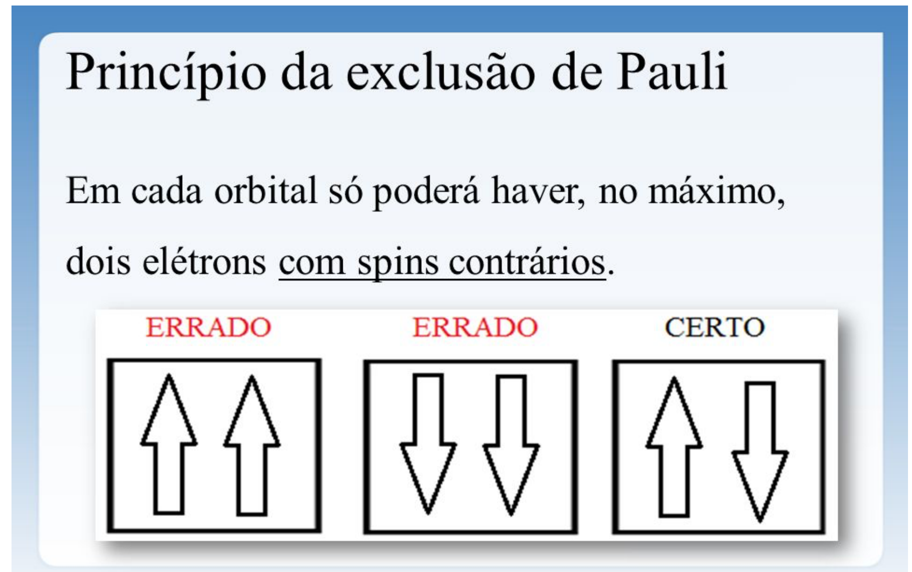
(férmion = spin 1/2)

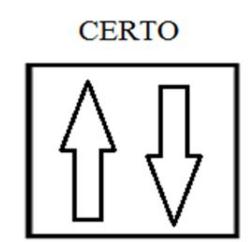
$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_\alpha(1)\,\psi_\alpha(2) - \psi_\alpha(1)\,\psi_\alpha(2) \right] = 0$$

PE resolve um problema do átomo de Bohr :

Porque os eletrons não ficam todos no estado fundamental ?

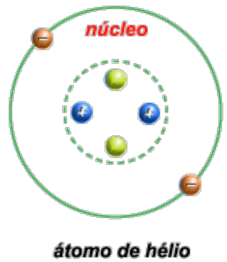






$$
\left\{
\begin{array}{lllll}
\alpha : & n = 1 & l = 0 & m = 0 & m_s = +1/2 \\
\beta : & n = 1 & l = 0 & m = 0 & m_s = -1/2
\end{array}
\right.
$$

Forças de troca e o átomo de Hélio



$$\psi_\alpha\,(x_1, y_1, z_1) \;=\; \psi_{n\,,\,l\,,\,m\,,\,m_s}\,(x_1, y_1, z_1) \;=\; \psi_a(1)\;\psi_{m_s}$$

autofunção espacial

autofunção de spin

Função de onda de dois eletrons:

$$\psi_T \;=\; \psi_a(1)\,\psi_b\,(2)\,\psi_{m_{s1}}\,\psi_{m_{s2}} \;=\; \psi_e\;\psi_{spin}$$

deve ser anti-simétrica !!!

$$\psi_e \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,[\,\psi_a\,(1)\,\psi_b\,(2)\;+\;\psi_b\,(1)\,\psi_a\,(2)\,]$$

ψ_{spin} anti-simétrica

$$\psi_e \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,[\,\psi_a\,(1)\,\psi_b\,(2)\;-\;\psi_b\,(1)\,\psi_a\,(2)\,]$$

ψ_{spin} simétrica

Exemplos:

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_a(1)\,\psi_b(2) + \psi_b(1)\,\psi_a(2) \right] \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\,|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\, \right]$$

simétrica anti-simétrica

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_a(1)\,\psi_b(2) - \psi_b(1)\,\psi_a(2) \right] \times \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\,|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\, \right]$$

anti-simétrica simétrica

Caso especial 1

$$x_1 \simeq x_2 \quad y_1 \simeq y_2 \quad z_1 \simeq z_2$$

$$\psi_a(1) \simeq \psi_a(2) \qquad \psi_b(1) \simeq \psi_b(2)$$

$$\psi_a(1)\,\psi_b(2) = \psi_b(1)\,\psi_a(2)$$

$$\psi_e = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(1)\,\psi_b(2) - \psi_b(1)\,\psi_a(2)\right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(2)\,\psi_b(1) - \psi_b(1)\,\psi_a(2)\right] = 0$$

Caso especial 1

$$x_1 \simeq x_2 \quad y_1 \simeq y_2 \quad z_1 \simeq z_2$$

$$\psi_a(1) \simeq \psi_a(2) \qquad\qquad \psi_b(1) \simeq \psi_b(2)$$

$$\psi_a(1)\,\psi_b(2) = \psi_b(1)\,\psi_a(2)$$

$$\psi_e = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(1)\,\psi_b(2) - \psi_b(1)\,\psi_a(2)\right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(2)\,\psi_b(1) - \psi_b(1)\,\psi_a(2)\right] = 0$$

0

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(1)\,\psi_b(2) - \psi_b(1)\,\psi_a(2)\right] \times \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\,\right]$$

Pequena probabilidade dos eletrons do tripleto estarem próximos !

"Repulsão" do tripleto !

Caso especial 2

$$x_1 \simeq x_2 \quad y_1 \simeq y_2 \quad z_1 \simeq z_2$$

$$\psi_a(1) \simeq \psi_a(2) \qquad \psi_b(1) \simeq \psi_b(2)$$

$$\psi_a(1)\,\psi_b(2) = \psi_b(1)\,\psi_a(2)$$

$$\psi_e = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,\psi_a(1)\,\psi_b(2) + \psi_b(1)\,\psi_a(2)\,\right]$$

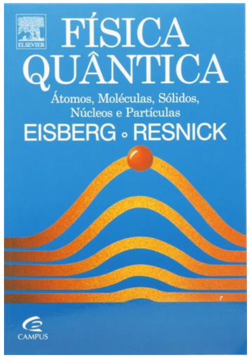
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,\psi_a(2)\,\psi_b(1) + \psi_b(1)\,\psi_a(2)\,\right] = \sqrt{2}\,\psi_b(1)\,\psi_a(2)$$

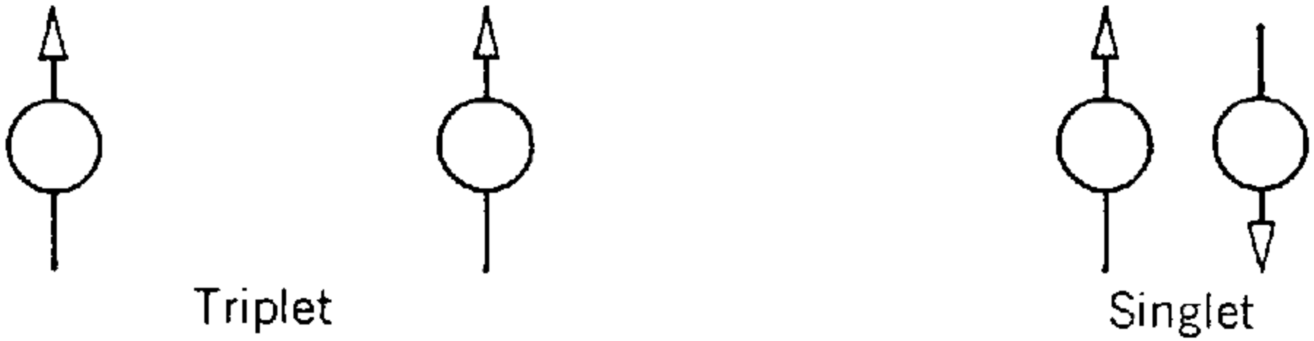
$$\psi_e^*\,\psi_e = 2\,\psi_b^*(1)\,\psi_a^*(2)\,\psi_b(1)\,\psi_a(2)$$

$$\int \psi_e^*\,\psi_e = 2\int d^3r_1\,\psi_b^*(1)\,\psi_b(1)\int d^3r_2\,\psi_a^*(2)\,\psi_a(2) = 2$$

Grande probabilidade dos eletrons do singleto estarem próximos !

"Atração" do singleto !

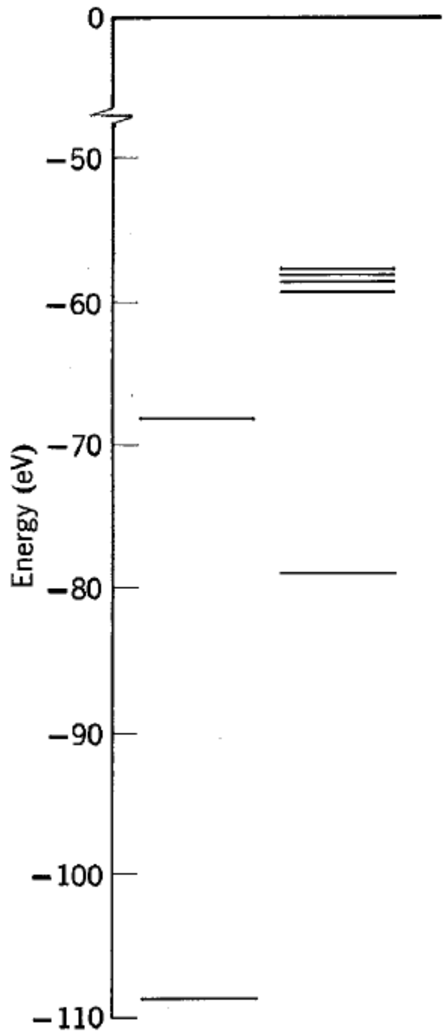




Forças de "troca"no átomo de Hélio

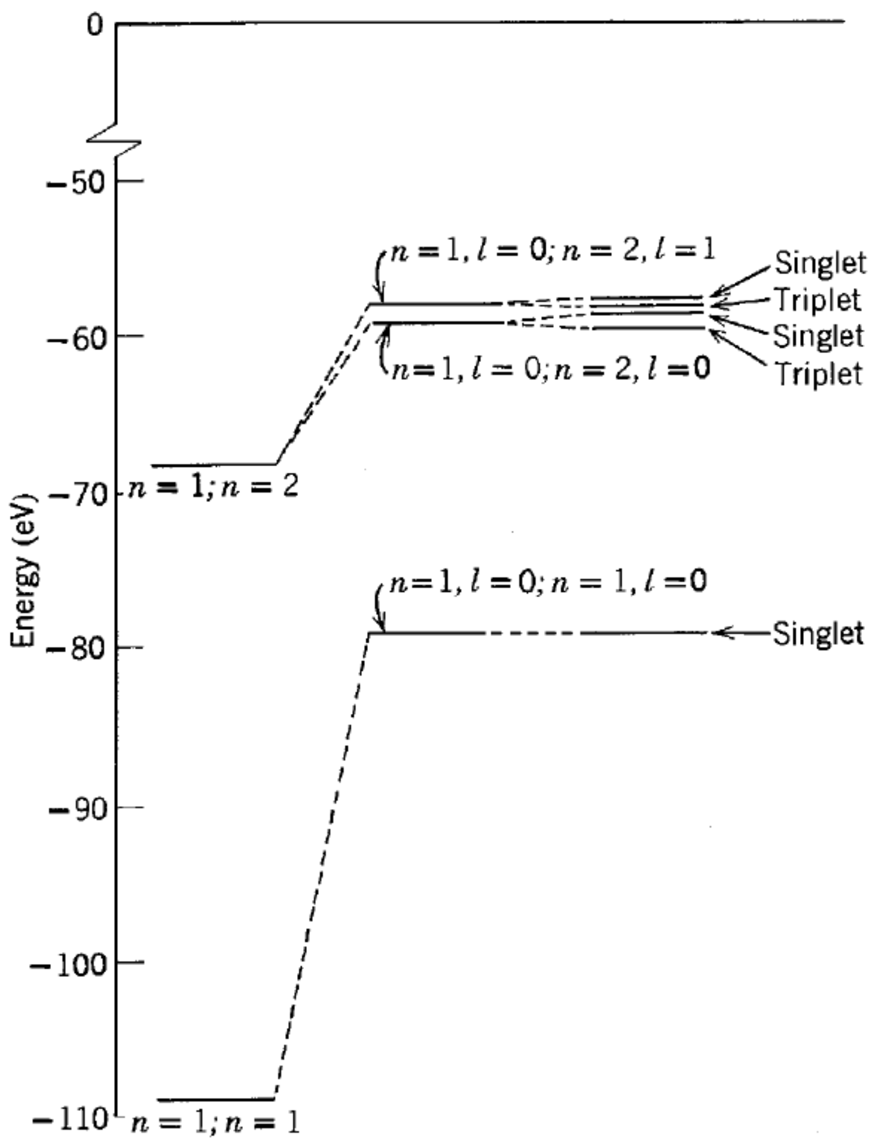
Níveis de energia
dos eletrons do Hélio

dois eletrons
independentes



Níveis observados !

Forças de "troca"no átomo de Hélio



Exercício: ler e entender este exemplo !