

Aula 10

Partículas idênticas

Princípio da exclusão de Pauli

"Para que servem tripletos e singletos ?"

Estados de spin de duas partículas

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

$$|\chi\rangle \rightarrow |\chi\rangle$$

Tripleto de spin 1

Conectados pelos operadores escada

Simétricos sob a troca de partículas

Singleto de spin 0

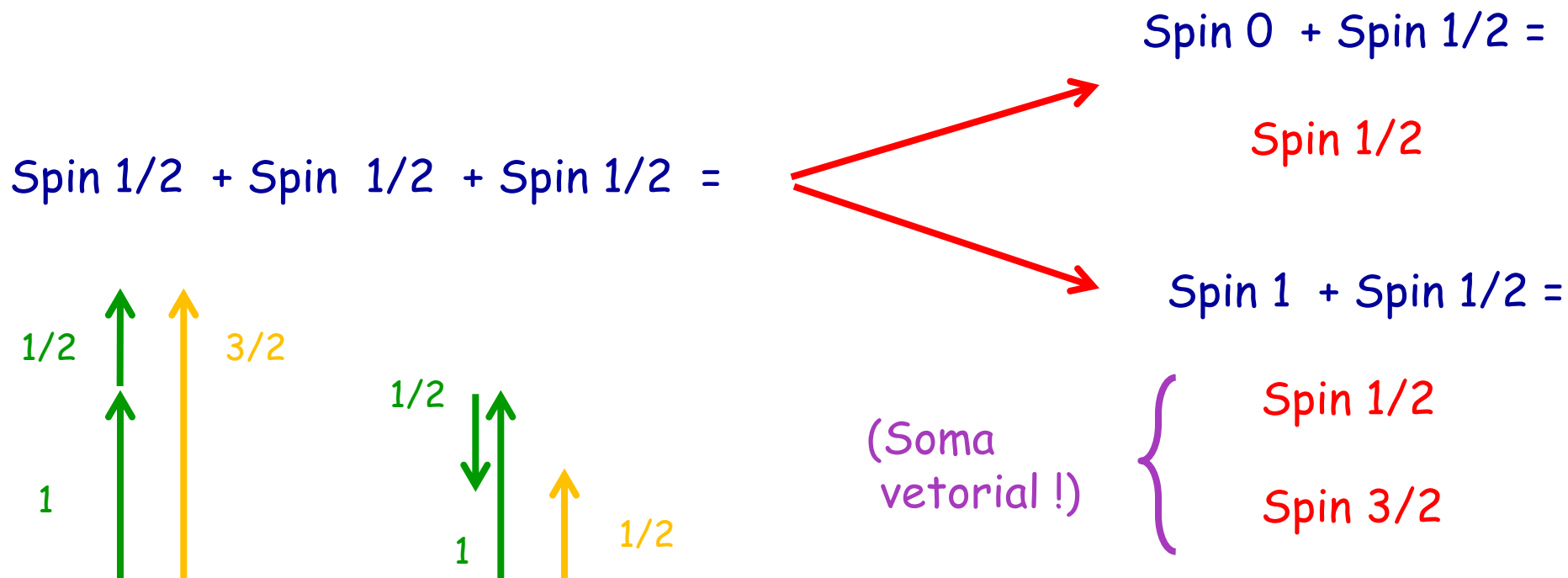
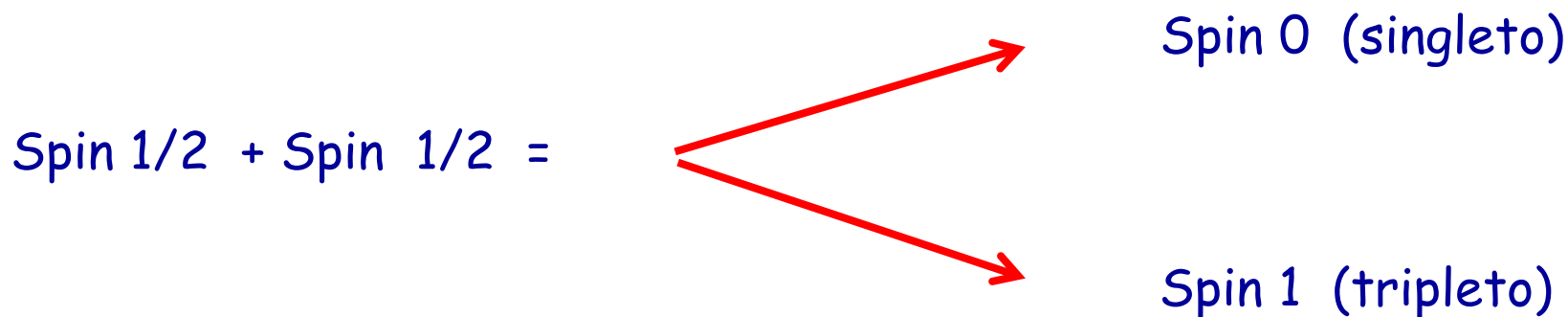
$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle]$$

"Aniquilado" pela escada

Antissimétrico sob a troca de partículas

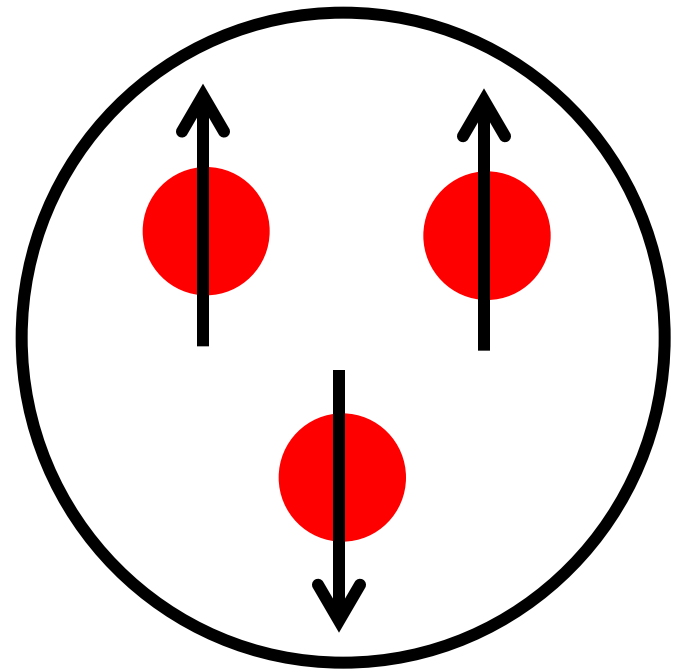
$$|\chi\rangle \rightarrow -|\chi\rangle$$

Estados de spin de três partículas



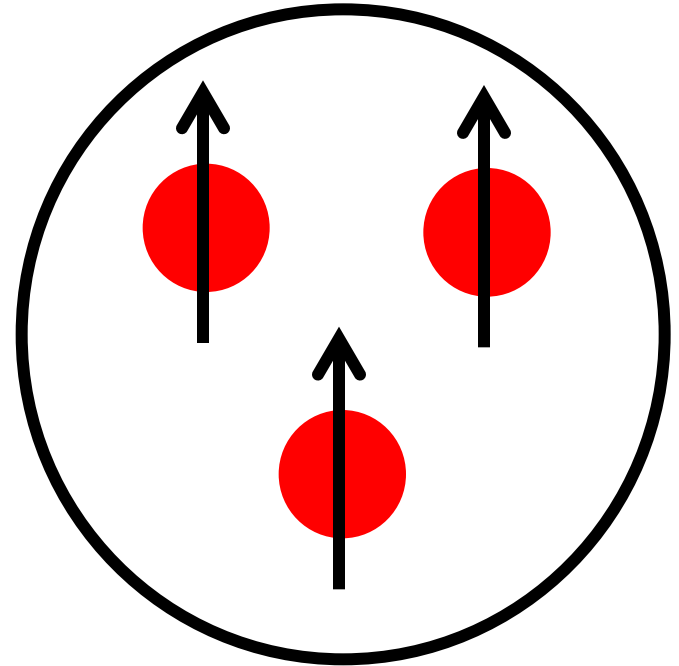
Spin $1/2$ = Próton

3 quarks com spin $1/2$

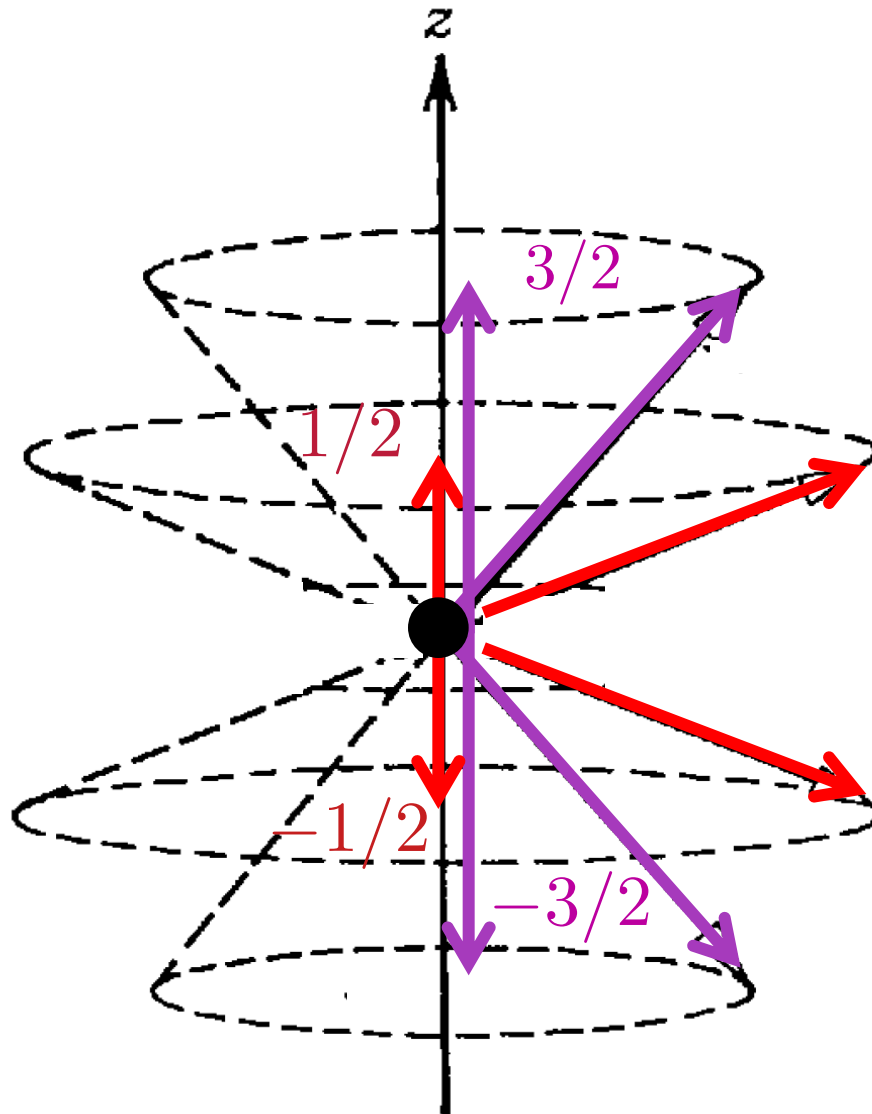


Spin $3/2$ = Delta Δ

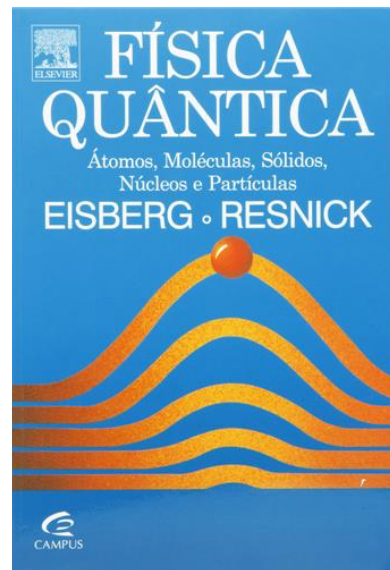
3 quarks com spin $1/2$



Spin da Delta :



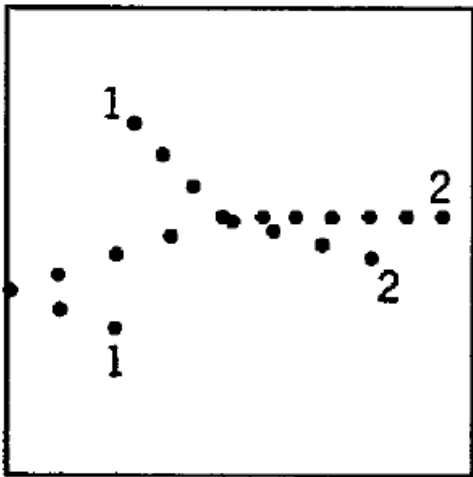
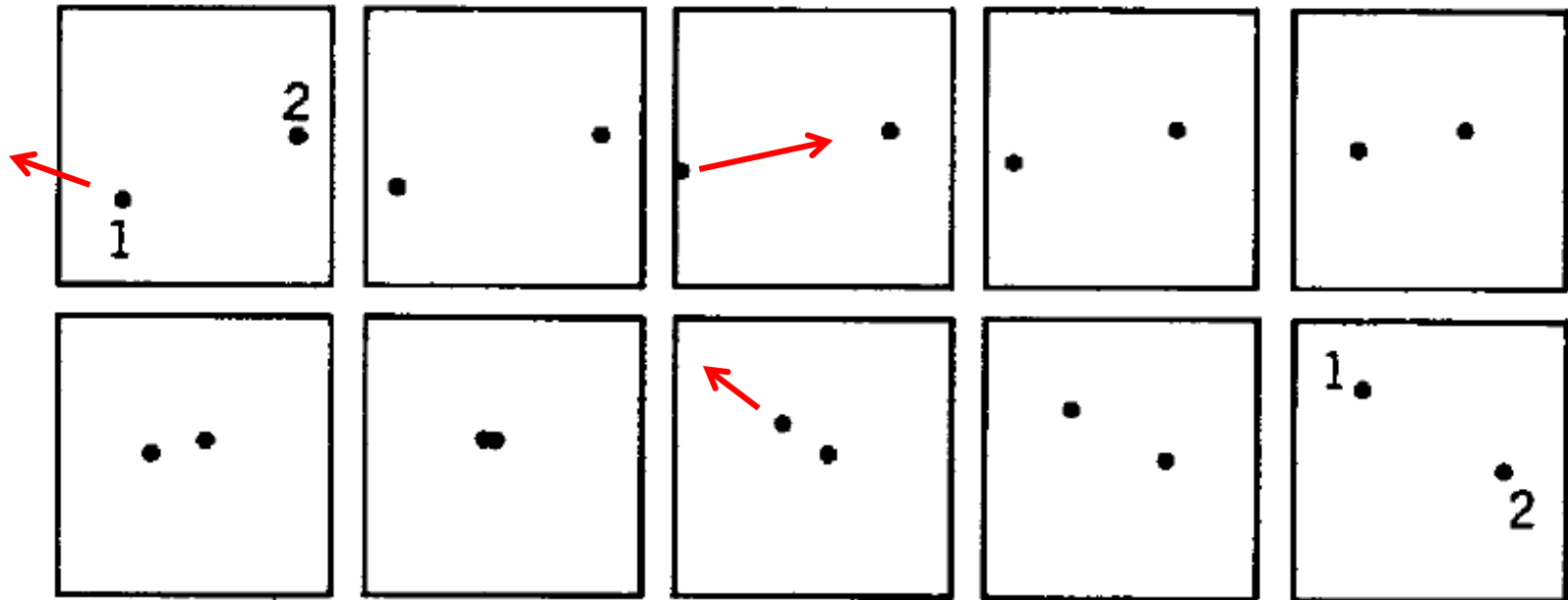
Partículas Idênticas



Capítulo 9

Partículas Idênticas :
idéia

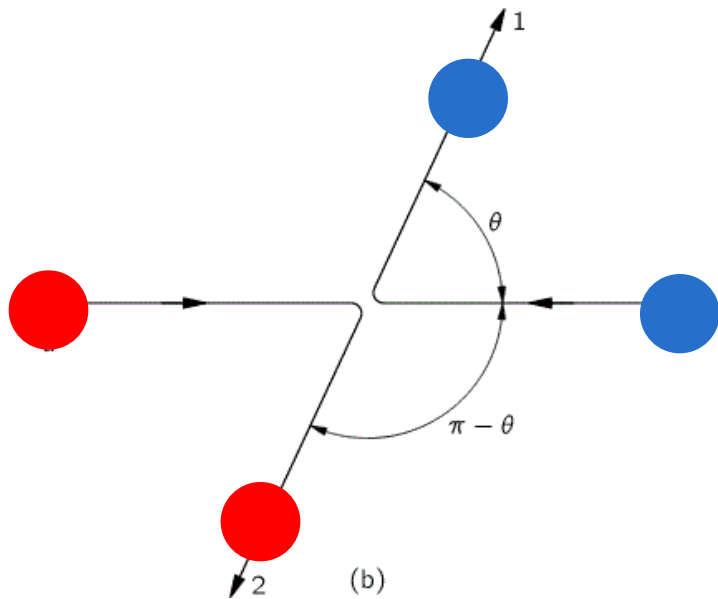
Física Clássica : acompanhamos no tempo cada uma das partículas : "bilhar"



"Distinguimos" a partícula 1 da 2

Colisão Clássica :

Colisão de duas partículas idênticas (dois elétrons)



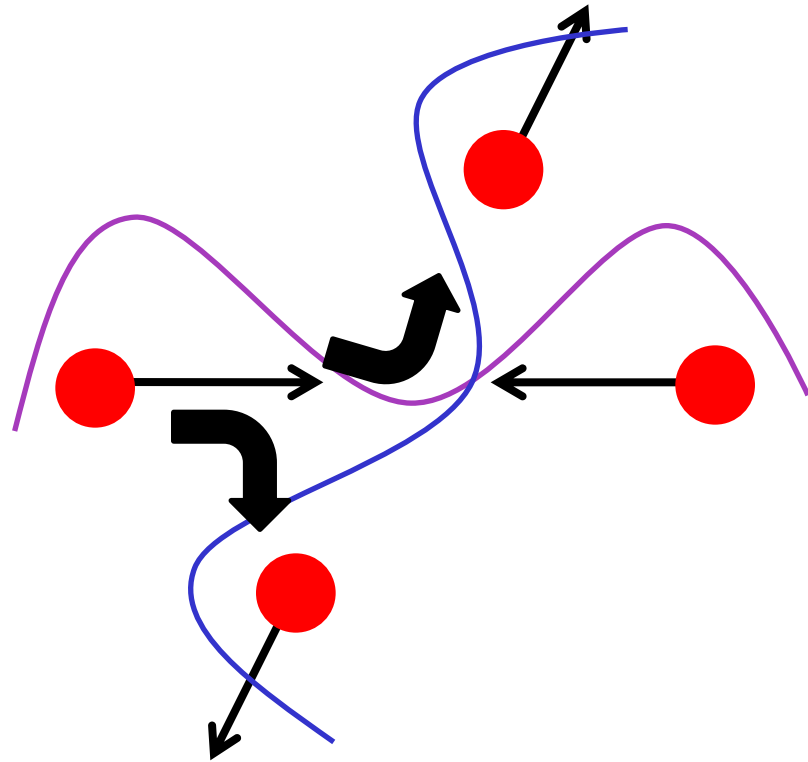
Podemos rotular ("pintar") cada partícula

Podemos definir bem as duas trajetórias

Podemos separar as duas partículas

Colisão Quântica :

Colisão de duas partículas idênticas (dois eletrons)

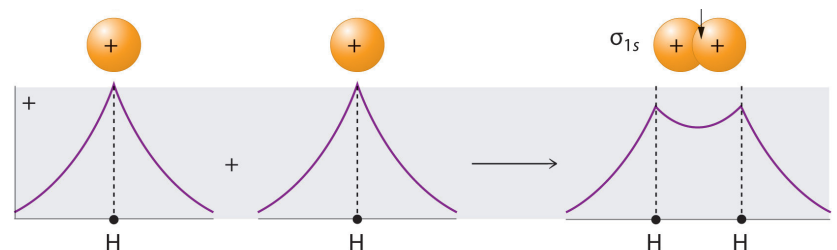


Não podemos rotular cada partícula

Não podemos definir as duas trajetórias

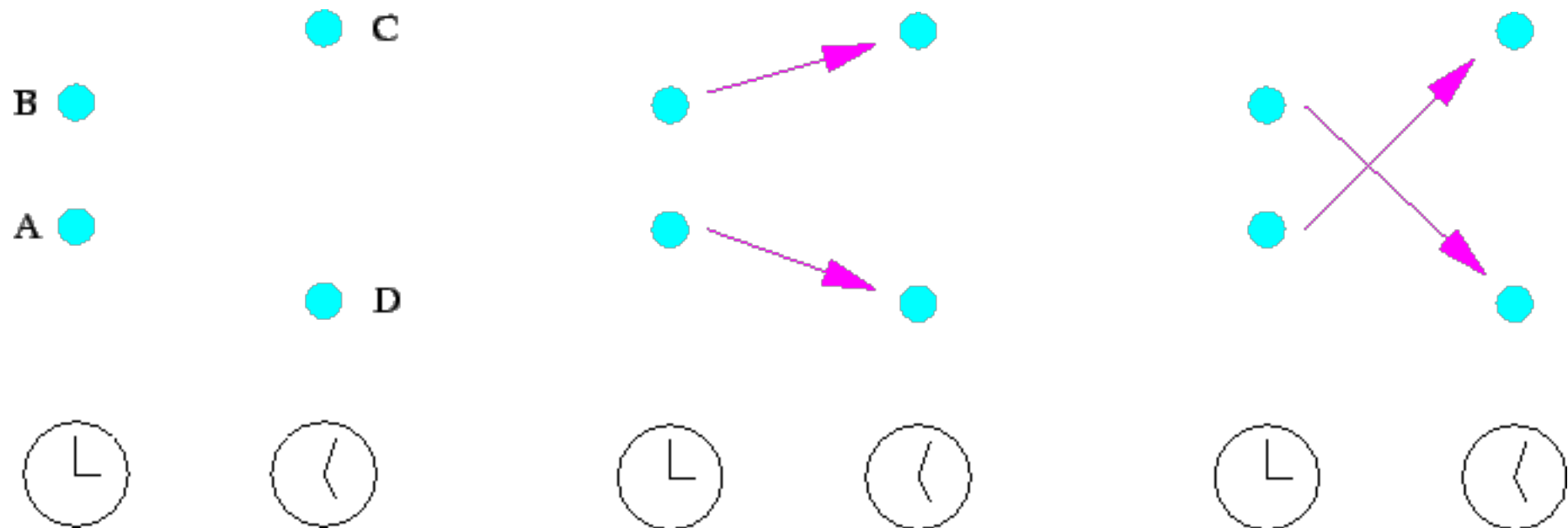
Não podemos separar as duas partículas

Superposição das
funções de onda !



Física Quântica :

Evolução temporal de dois eletrons

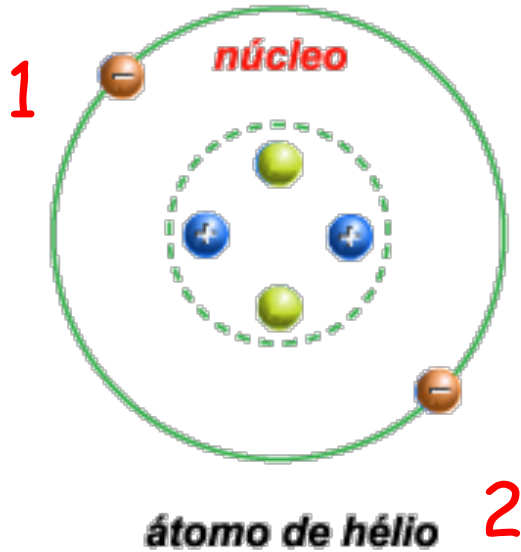


Dois eletrons são **indistinguíveis** !

Partículas Idênticas : descrição matemática

Qual é a função de onda que
descreve duas partículas idênticas ?

Sistemas de duas partículas independentes



1 e 2 não interagem !

Para duas partículas **distinguíveis**:

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

é solução da eq. de Schrödinger !

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

números
quânticos
espaciais

número
quântico
de spin

Função de onda de duas partículas = produto das funções de onda de cada partícula

$$\begin{cases} \psi_{\alpha}(x_1, y_1, z_1) = \psi_{\alpha}(1) \\ \psi_{\beta}(x_2, y_2, z_2) = \psi_{\beta}(2) \end{cases}$$



1

2

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

$$\begin{cases} \psi_{\beta}(x_1, y_1, z_1) = \psi_{\beta}(1) \\ \psi_{\alpha}(x_2, y_2, z_2) = \psi_{\alpha}(2) \end{cases}$$



1

2

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

Grandeza observável não deve mudar se permutarmos as coordenadas !

Exemplo: densidade de probabilidade : $P = \psi^* \psi$

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

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

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

$$\psi_\alpha^*(1) \psi_\beta^*(2) \psi_\alpha(1) \psi_\beta(2) \rightarrow \psi_\alpha^*(2) \psi_\beta^*(1) \psi_\alpha(2) \psi_\beta(1) \quad (B)$$

(A) é diferente de (B) !



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

Não é boa !!!

Duas alternativas que funcionam:

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1) \psi_\beta(2) + \psi_\beta(1) \psi_\alpha(2)] \quad (\text{simétrica})$$

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

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

$$\psi_S \rightarrow \psi_S$$

$$\psi_S^* \psi_S \rightarrow \psi_S^* \psi_S$$

$$\psi_A \rightarrow -\psi_A$$

$$\psi_A^* \psi_A \rightarrow \psi_A^* \psi_A$$

Densidade de probabilidade não muda quando trocamos as posições !!!

Como escolher entre as duas ?

Partículas de spin $1/2, 3/2, \dots$ = Fermions

Para fermions escolhemos ψ_A

Partículas de spin $0, 1, 2, \dots$ = Bosons

Para bosons escolhemos ψ_S



Teoria quântica de campos !

Partículas Idênticas:
princípio da exclusão

Princípio da Exclusão

É o meu !!!



Wolfgang Pauli

Versão fraca:

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

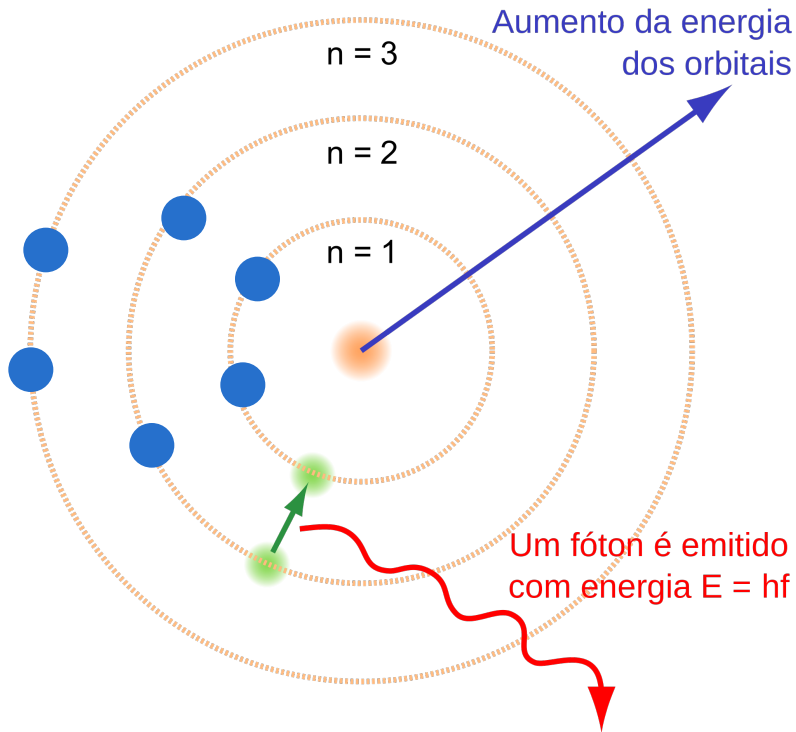
$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1) \psi_\alpha(2) - \psi_\alpha(1) \psi_\alpha(2)] = 0$$

Versão forte:

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

PE resolve um problema do átomo de Bohr :

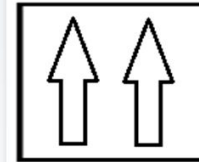
Porque os eletrons não ficam todos no estado fundamental ?



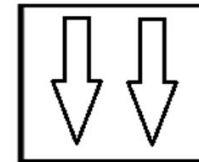
Princípio da exclusão de Pauli

Em cada orbital só poderá haver, no máximo, dois elétrons com spins contrários.

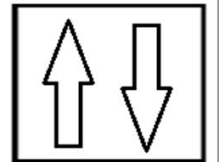
ERRADO



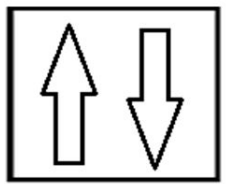
ERRADO



CERTO



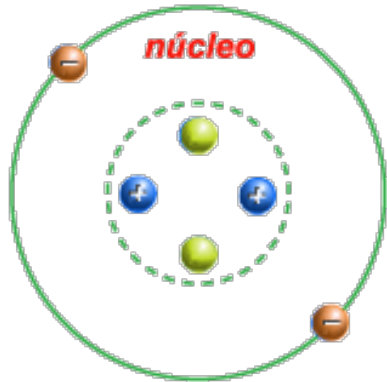
CERTO



$$\alpha : \quad n = 1 \quad l = 0 \quad m = 0 \quad m_s = +1/2$$

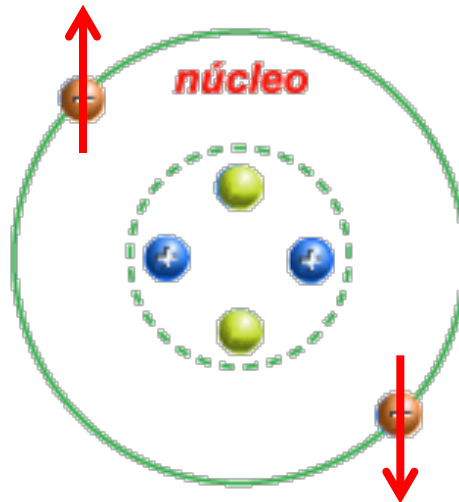
$$\beta : \quad n = 1 \quad l = 0 \quad m = 0 \quad m_s = -1/2$$

Partículas Idênticas: "forças" de troca no átomo de Hélio

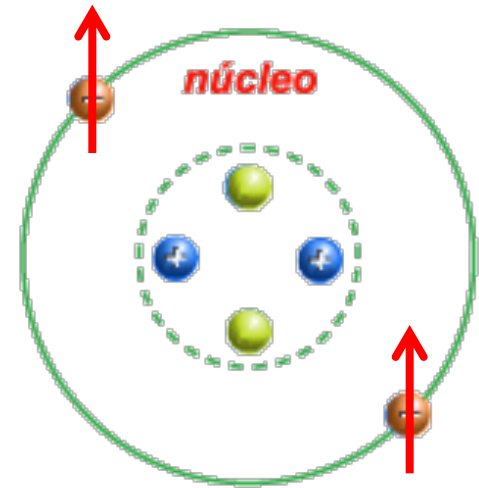


átomo de hélio

Os dois eletrons não interagem eletricamente mas pode haver uma repulsão ou atração entre eles: um efeito quântico gerado **pelo spin !**



Atração !



Repulsão !

Melhorando a notação:

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

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 !!!

Há duas possibilidades:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \psi_e = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2)] & \begin{array}{l} \psi_{spin} \\ \text{anti-simétrica} \end{array} \\ \psi_e = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1) \psi_b(2) - \psi_b(1) \psi_a(2)] & \begin{array}{l} \psi_{spin} \\ \text{simétrica} \end{array} \end{array} \right.$$

simétrica anti-simétrica

Exemplos:

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

simétrica

anti-simétrica

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

anti-simétrica

simétrica

Elétrons próximos : $x_1 \simeq x_2 \quad y_1 \simeq y_2 \quad z_1 \simeq z_2$

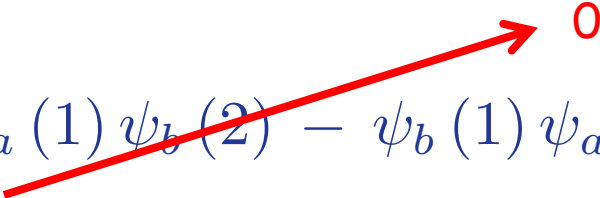
$$\psi_a(1) \simeq \psi_a(2)$$

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

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

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

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

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


Pequena probabilidade dos elétrons do tripleto estarem próximos !

"Repulsão" do tripleto !

Elétrons próximos : $x_1 \simeq x_2 \quad y_1 \simeq y_2 \quad z_1 \simeq z_2$

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

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

$$\begin{aligned} \psi_e &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(2) \psi_b(1) + \psi_b(1) \psi_a(2)] = \sqrt{2} \psi_b(1) \psi_a(2) \end{aligned}$$

Não há supressão como no caso anterior !

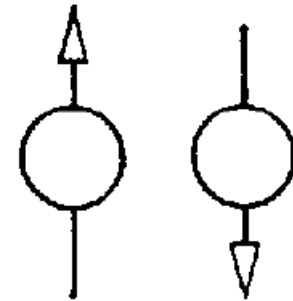
Maior probabilidade dos elétrons do singlete estarem próximos !

"Atração" do singlete !



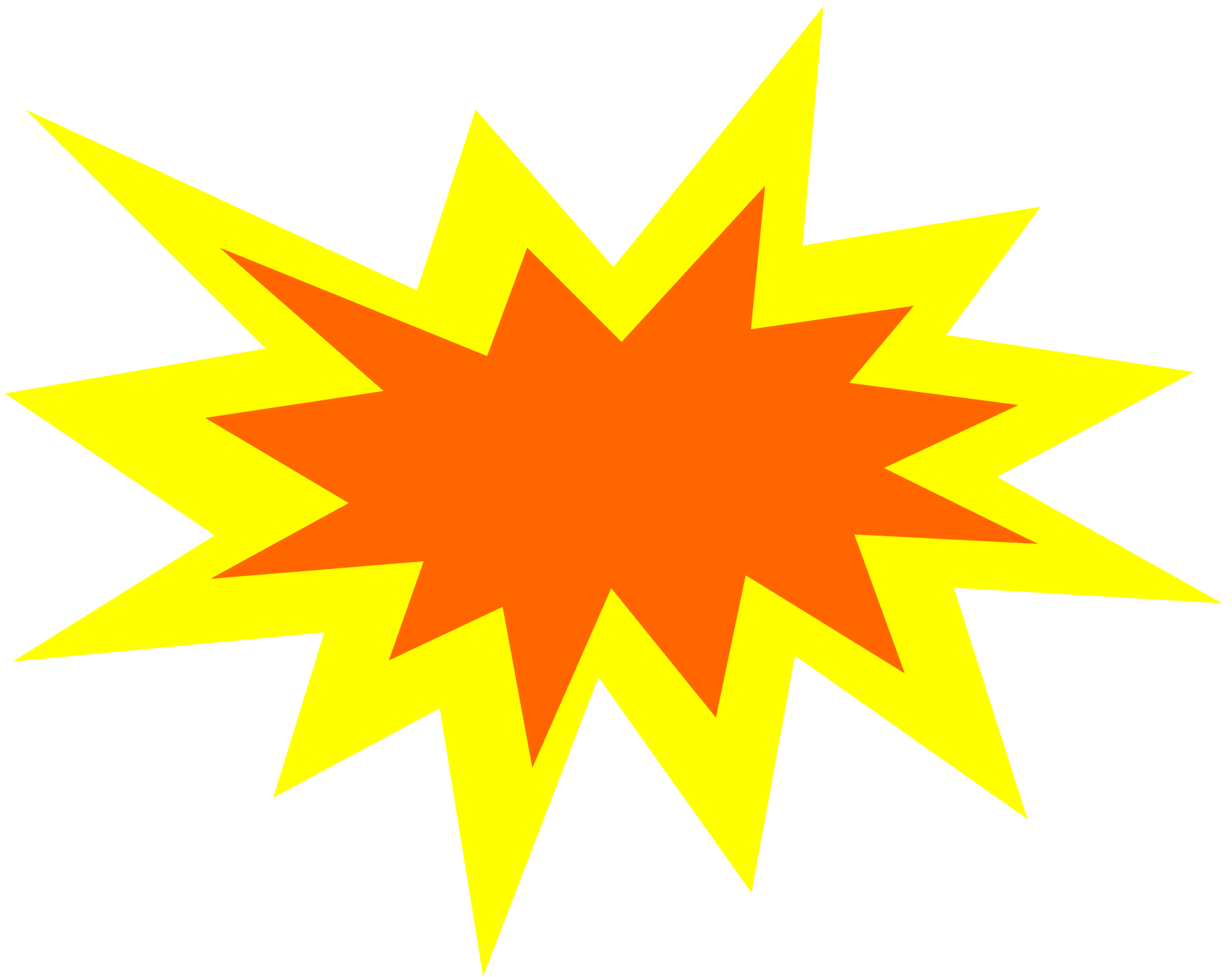
Triplet

"Repulsão" do tripleto !



Singlet

"Atração" do singleto !



Estados de spin de duas partículas

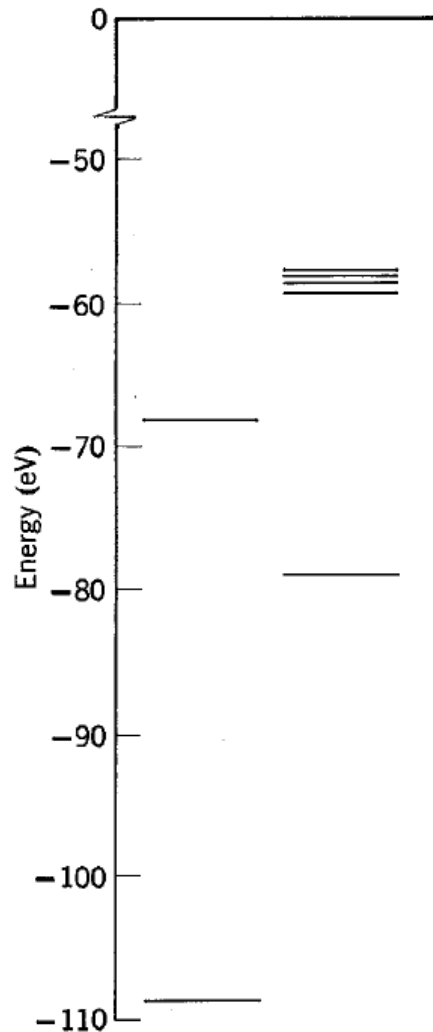
$$\left\{ \begin{array}{l} |1 \ 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} = \left|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right\rangle \left|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right\rangle \\ |1 \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right\rangle \left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle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

$$|s \ m_s\rangle = \sum_{m_1 \ m_2} C_{m_1 \ m_2}^{s_1 \ s_2} |s_1 \ m_1\rangle |s_2 \ m_2\rangle$$

Forças de "troca" no átomo de Hélio

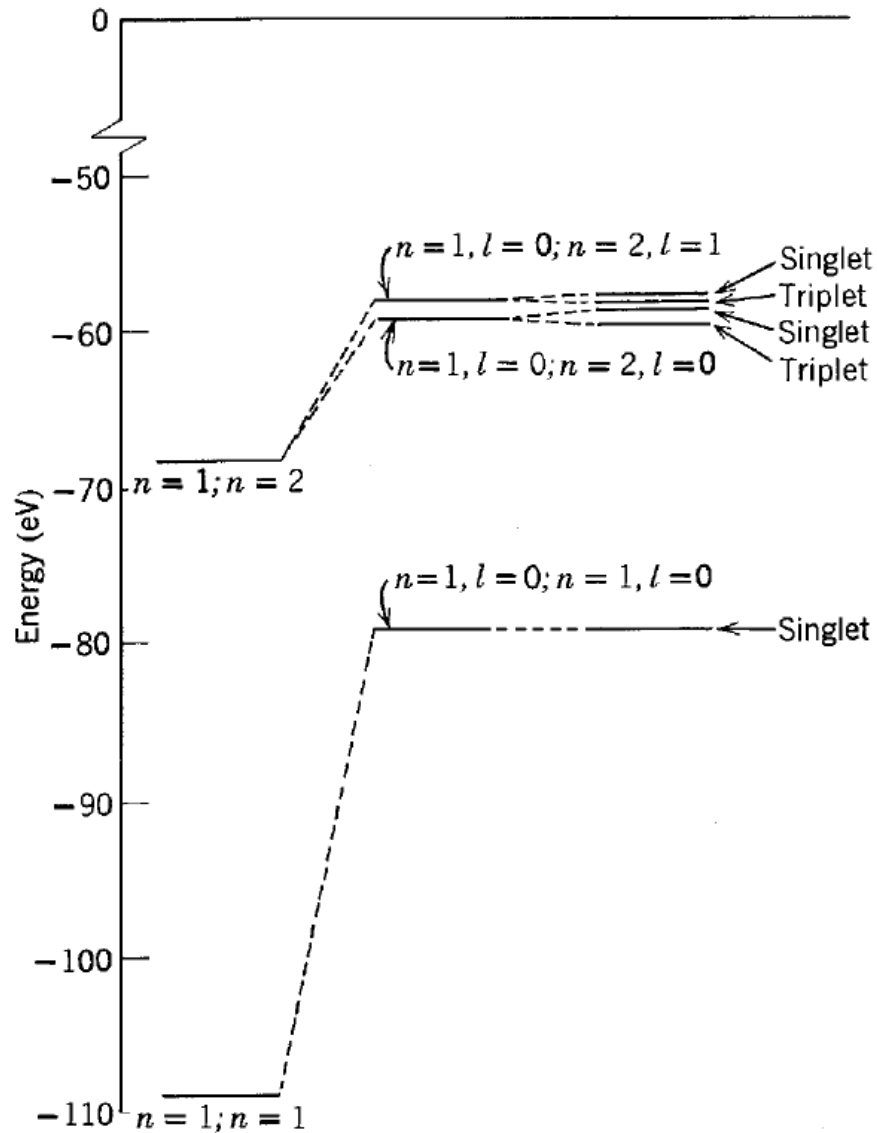
Níveis de energia
dos eletrons do Hélio

dois eletrons
independentes



Níveis observados !

Forças de "troca" no átomo de Hélio



Exercício: ler e entender este exemplo !

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

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

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

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 + ...)

Estados de spin de duas partículas

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

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

Coeficientes de Clebsch-Gordan

