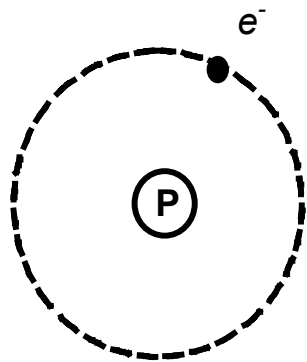


André Bathista

Indistingüibilidade Quântica

Exemplos:

1 Próton e 1 Elétron



$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

são distingüíveis, massas diferentes e cargas diferentes

2 elétrons

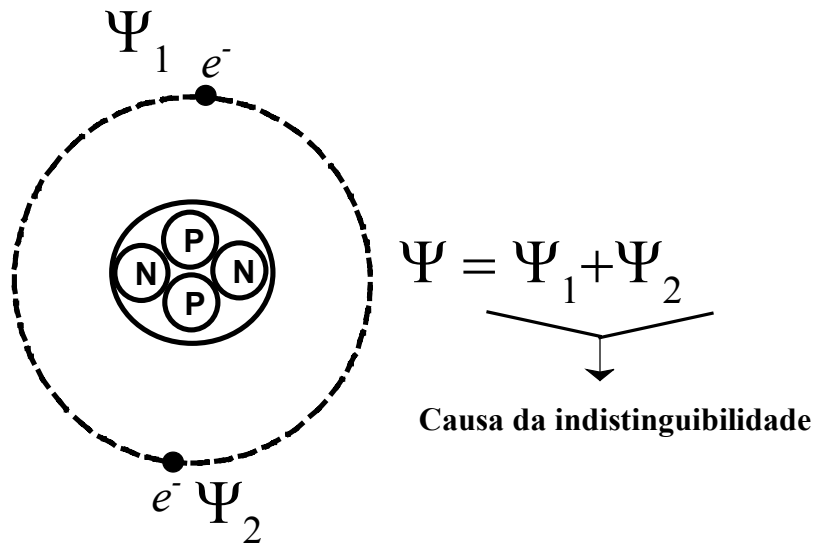
$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

Ψ_1 1 Ψ_1 ?

Ψ_2 2 Ψ_2 ?



Um exemplo claro disto é o átomo de Hélio (He)



A equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar}{2m} [\nabla^2 \Psi_1 - \nabla^2 \Psi_2] + V_T \Psi_T = E_T \Psi_T$$

onde m é a massa qualquer das partícula

$\Psi_T(x_1, \dots, z_2)$ = autofunção para o sistema total

$V_T(x_1, \dots, z_2)$ = energia potencial para o sistema total

E_T = energia total para o sistema total

As autofunções das partículas

$$\Psi_1 \rightarrow \Psi_\alpha(x_1, y_1, z_1) \rightarrow \Psi_\alpha(1)$$

$$\Psi_2 \rightarrow \Psi_\beta(x_2, y_2, z_2) \rightarrow \Psi_\beta(2)$$

Logo

$$\Psi = \Psi_{\alpha}(1) + \Psi_{\beta}(2) \quad \begin{array}{l} \text{Partícula (1) no estado } \alpha \text{ e} \\ \text{Partícula (2) no estado } \beta. \end{array}$$

Agora para o caso em que a partícula (1) está no estado β , e a partícula (2) está no estado α , é

$$\Psi = \Psi_{\beta}(1) + \Psi_{\alpha}(2) \quad \text{n}^{\circ} \text{ quânticos permutados}$$

Densidade de Probabilidade

$$\Psi^* \Psi = \Psi_{\alpha}^*(1) \Psi_{\beta}^*(2) \Psi_{\alpha}(1) \Psi_{\beta}(2)$$

$$\Psi^* \Psi = \Psi_{\beta}^*(1) \Psi_{\alpha}^*(2) \Psi_{\beta}(1) \Psi_{\alpha}(2)$$

estas não são consideradas do pontos de vista físico !!!

Autofunção de simetria

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_{\alpha}(1) \Psi_{\beta}(2) + \Psi_{\beta}(1) \Psi_{\alpha}(2) \right]$$

Autofunção de antissimetria

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_{\alpha}(1) \Psi_{\beta}(2) - \Psi_{\beta}(1) \Psi_{\alpha}(2) \right]$$

sendo que $\Psi_S \neq \Psi_A$, mas correspondem ao mesmo autovalor de E_T , o que é conhecido como degenerescência de troca pois a diferença entre as autofunções degeneradas se relaciona com a troca das coordenadas das partículas. O fator $1/\sqrt{2}$ assegura que Ψ_S e Ψ_A estarão normailizadas se $\Psi_T = \Psi_\alpha(1) + \Psi_\beta(2)$ e $\Psi_T = \Psi_\beta(1) + \Psi_\alpha(2)$ estiverem normailizados.

Calculando as funções densidade de probabilidade para Ψ_S e Ψ_A , e mostrando que os seus valores não se alteram pela troca das partículas. Obteremos esse resultado analisando o efeito da troca das partículas sobre as próprias autofunções

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2) + \Psi_\beta(1)\Psi_\alpha(2)] \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(2)\Psi_\beta(1) + \Psi_\beta(2)\Psi_\alpha(1)] = \Psi_S$$

$$1 \rightarrow 2$$

$$2 \rightarrow 1$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2) - \Psi_\beta(1)\Psi_\alpha(2)] \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(2)\Psi_\beta(1) - \Psi_\beta(2)\Psi_\alpha(1)] = -\Psi_A$$

$$1 \rightarrow 2$$

$$2 \rightarrow 1$$

$$\Psi_S^* \Psi_S \rightarrow \Psi_S^* \Psi_S \quad e \quad \Psi_A^* \Psi_A \rightarrow (-1)^2 \Psi_A^* \Psi_A = \Psi_A^* \Psi_A$$

Para as duas funções totais, simétrica e antissimétrica, as funções densidade de probabilidade não se altera por permutação das partículas.

Notando-se que a autofunção de antissimetria para duas partículas normalizadas

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2) - \Psi_\beta(1)\Psi_\alpha(2) \right]$$

também pode ser expressa na forma de determinantes, mais precisamente *determinante de Slater*

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \Psi_\alpha(1) & \Psi_\alpha(2) \\ \Psi_\beta(1) & \Psi_\beta(2) \end{vmatrix}$$

onde $2! = 2 \times 1 = 2$. A identidade dessas duas expressões pode ser verificada expandindo-se o determinante. Em forma de determinante, a extensão para três partículas é

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \Psi_\alpha(1) & \Psi_\alpha(2) & \Psi_\alpha(3) \\ \Psi_\beta(1) & \Psi_\beta(2) & \Psi_\beta(3) \\ \Psi_\gamma(1) & \Psi_\gamma(2) & \Psi_\gamma(3) \end{vmatrix}$$

onde $3! = 3 \times 2 \times 1 = 6$. A expansão deste determinante fornece

$$\begin{aligned} \Psi_A = \frac{1}{\sqrt{3!}} & \left[\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2)\Psi_\gamma(3) + \Psi_\beta(1)\Psi_\gamma(2)\Psi_\alpha(3) \right. \\ & + \Psi_\gamma(1)\Psi_\alpha(2)\Psi_\beta(3) - \Psi_\gamma(1)\Psi_\beta(2)\Psi_\alpha(3) \\ & \left. - \Psi_\beta(1)\Psi_\alpha(2)\Psi_\gamma(3) - \Psi_\alpha(1)\Psi_\gamma(2)\Psi_\beta(3) \right] \end{aligned}$$

Para um sistema de n elétrons cada determinante de Slater terá a forma

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \Psi_{\alpha}(1) & \Psi_{\alpha}(2)\dots & \Psi_{\alpha}(n) \\ \Psi_{\beta}(1) & \Psi_{\beta}(2)\dots & \Psi_{\beta}(n) \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ \Psi_k(1) & \Psi_k(2) & \Psi_k(n) \end{vmatrix}$$

note-se que uma função do tipo determinante satisfaz o princípio de antissimetria. Assim, para trocar as coordenadas de dois elétrons basta permutar duas filas, o que muda o sinal ao determinante. E se esta se duas funções de estado Ψ (orbitais-spin) coincidirem, o determinante de Slater anular-se-á visto com duas filas iguais.