UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
Instituto de Física
Departamento de Física
Disciplina: Física do Século XX B
Prof. César Augusto Zen Vasconcellos
LISTA TEMÁTICA E DE PROBLEMAS No. 5 - Princípio de Exclusão de PAULI (WOLFGANG PAULI (1900-1958)). Princípio de Exclusão de PAULI. Partícula Única em Caixa Unidimensional. Muitas Partículas em Caixa Unidimensional.

Introdução. Consideramos nos textos anteriores sistemas quantum mecânicos que possuem vários níveis de energia mas somente um elétron orbital, ou seja, consideramos até o presente momento átomos hidrogenóides. Os resultados apresentados mostravam que, na ausência de acoplamento spin-órbita, o comportamento do elétron é determinado por meio do conhecimento dos números quânticos

$$n,\ \ell\ ,\ m_\ell\ ,\ m_s \qquad (1)$$

Estes números quânticos estão associados respectivamente à energia, ao momentum angular orbital, à sua componente no eixo de quantização e à componente, no eixo de quantização, do momentum angular intrínseco (spin). Dizemos então que

quando estes quatro números quânticos são dados,
o estado físico do sistema (no caso, um elétron) é então especificado.

A seguir, neste texto e em textos que seguem, iniciamos outra análise, a de sistemas que contem vários níveis de energia e vários elétrons.

O Princípio de Exclusão de Pauli. Ao analisar dados espectroscópicos de átomos de muitos elétrons, Wolgang Pauli concluiu, em 1924, que:

em um sistema quântico, dois elétrons
não podem ocupar o mesmo estado físico simultaneamente.

Este entendimento, chamada de Princípio de Exclusão de Pauli, pode ser compreendido da seguinte forma. Consideremos a equação de Schrödinger de dois corpos. escrita como

$$H(1,2)\ \psi(1,2) = E\ \psi(1,2) \qquad (2)$$

Neste expressão, $H(1,2)$ caracteriza o operador Hamiltoniano[1] e os índices 1 e 2 caracterizam as coordenadas do espaço-tempo dos dois corpos, $(\mathbf{r}_1(x_1,y_1,z_1),t)$ e $(\mathbf{r}_2(x_2,y_2,z_2),t)$.

Partindo do pressuposto que as partículas 1 e 2 são idênticas, ao realizarmos a operação de troca 1 ⇔ 2, concluímos que, pelo fato das partículas serem idênticas, então a descrição matemática do sistema não deve se alterar.

---

[1] Operador Hamiltoniano é uma expressão utilizada em mecânica quântica para caracterizar um operador que, atuando em um auto-estado que representa uma solução da equação de Schrödinger, a operação em foco gera, como auto-valor, a energia total do sistema, E:

$$H\,|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle$$

$$H|\psi(t)\rangle = E|\psi(t)\rangle$$

Então, matematicamente, a condição acima pode ser escrita na forma

$$H(1,2) = H(2,1) \qquad (3)$$

Chegamos portanto à conclusão que

o operador Hamiltoniano H(1,2) de duas partículas idênticas
é simétrico frente à operação de troca 1 ⇔ 2

Como resultado, ao procedermos a substituição *1 ⇔ 2* na expressão (2), devido à condição matemática expressa pela equação (3), obtemos,

$$[H(1,2)\ \psi(1,2) = E\ \psi(1,2)]_{1 \Leftrightarrow 2} \Rightarrow H(2,1)\ \psi(2,1) = E\ \psi(2,1)$$

$$\Rightarrow H(1,2)\ \psi(2,1) = E\ \psi(2,1) \qquad (4)$$

Esta expressão mostra que as funções $\psi(1,2)$ e $\psi(2,1)$ são ambas soluções do problema Hamiltoniano, com idêntico valor de energia. Dizemos então que as funções $\psi(1,2)$ e $\psi(2,1)$ são auto-funções do operador Hamiltoniano H(1,2), e denominamos o valor de energia, E, de auto-valor. Dizemos ainda, que o sistema em foco é *degenerado* e que uma combinação linear do tipo

$$\Psi(1,2) = A\psi(1,2) + B\psi(2,1) \qquad (5)$$

é também solução do operador Hamiltoniano *H(1,2)*, com o mesmo auto-valor E.

E como as partículas 1 e 2 são indistinguíveis, todas as quantidades físicas mensuráveis associadas ao sistema de duas partículas 1 e 2 devem também permanecerem inalteradas frente *à operação de troca 1 ⇔* 2. E como, na teoria de Schrödinger, todas as quantidades fisicamente mensuráveis do sistema devem ser proporcionais ao módulo ao quadrado da função de onda, resulta então a condição:

$$|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2 \qquad (6)$$

A condição acima leva ao resultado A = ± B ≡ ± 1 (ver problema 2). Desta forma, somente existem duas soluções possíveis para o sistema de duas partículas idênticas, uma solução simétrica

$$\Psi_{simétrica}(1,2) = \psi(1,2) + \psi(2,1) = \Psi_{simétrica}(2,1) \qquad (7)$$

e uma solução anti-simétrica

$$\Psi_{anti\text{-}simétrica}(1,2) = \psi(1,2) - \psi(2,1) = - \Psi_{anti\text{-}simétrica}(2,1) \qquad (8)$$

Um aspecto importante a ser assinalado é que o caráter de simetria de uma função de onda é uma constante de movimento. Assim, um par de partículas idênticas será descrito por uma função de onda com simetria bem definida. Quando consideramos um conjunto extenso de partículas idênticas, estas devem ser descritas por métodos da chamada mecânica estatística, que estabelece que existem dois tipos de partículas idênticas, aquelas que obedecem a estatística de Bose-Einstein e aquelas que obedecem a estatística de Fermi-Dirac. Os resultados desta área do conhecimento indicam que partículas de Bose-Einstein (*bósons*) devem ser descritas por soluções simétricas da equação de Schrödinger enquanto que partículas de Fermi-Dirac (*férmions*) devem ser descritas por soluções anti-simétricas da equação de Schrödinger.

Elétrons, por serem férmions, devem portanto ser descritos por soluções anti-simétricas da equação de Schrödinger. No caso em que dois elétrons ocupassem, em um dado sistema, idênticos estados físicos, então teríamos, como solução da equação de Schrödinger

$$\Psi_{anti\text{-}simétrica}(1,2) = [\psi(1,2) - \psi(2,1)]_{1=2} = \psi(n\ell m_\ell m_s) - \psi(n\ell m_\ell m_s) = 0$$

onde a nomenclatura (1=2) é uma forma indicativa de que os números quânticos n, ℓ , m_ℓ , m_s , de ambas as partículas, são iguais, ou seja $n(1) = n(2) = n$; $\ell(1) = \ell(2) = \ell$; $m_\ell(1) = m_\ell(2) = m_\ell$ e $m_s(1) = m_s(2) = m_s$. A conclusão a que chegamos é então sintetizada no Princípio de Exclusão de Pauli:

em um sistema quântico, dois elétrons
não podem ocupar o mesmo estado físico simultaneamente.

Partícula Única em uma Caixa Unidimensional. O problema de uma partícula única confinada em uma *caixa unidimensional* de comprimento L, revela que a energia da partícula varia de maneira discreta, cujos valores são dados pela expressão

$$E_n = n^2 (h^2/8mL^2), \text{ com } n = 1,2,3,...$$

Os níveis correspondentes de energia da partícula são mostrados nas figuras abaixo. Para a compreensão destes resultados, consideramos que as partículas em foco são elétrons, cuja magnitude de spin é ½ $\hbar$. Devido à forma da solução de energia acima apresentada, o estado físico da partícula será caracterizado pelo par de números quânticos (n,m_s) apenas.

A figura (1) apresenta distintas soluções para o problema de partícula-única confinada em uma caixa unidimensional. Interprete o resultado da figura (1) à luz do Princípio de Exclusão de Pauli (Problema 4).

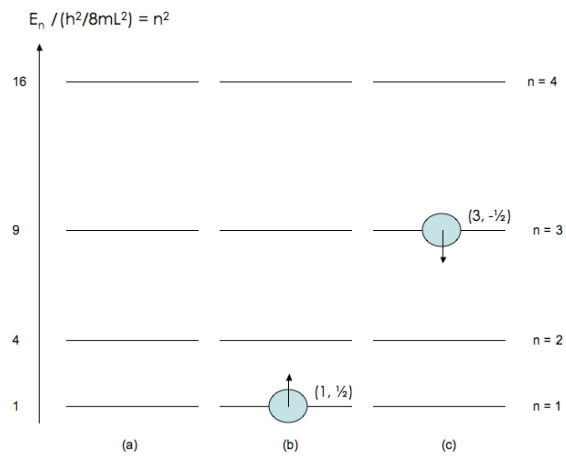

Figura (1)

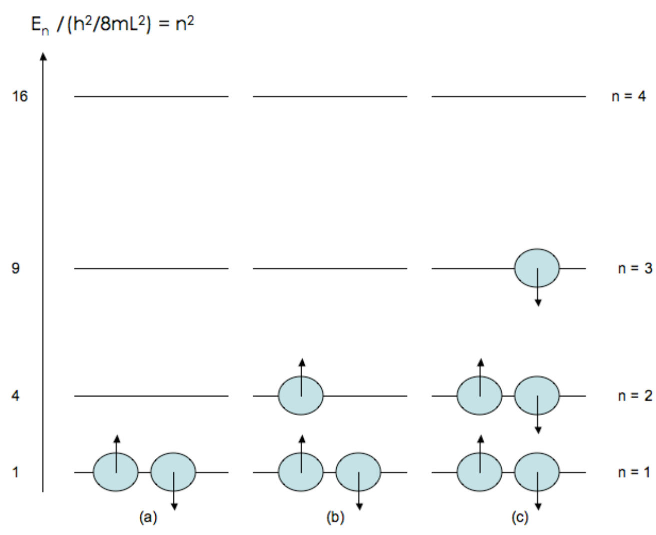

Figura (2)

Muitas Partículas em uma Caixa Unidimensional. A figura (2) mostra o resultado correspondente quando consideramos muitas partículas confinadas em uma caixa. Consideramos, nas figuras, por simplicidade, que os níveis de energia não são alterados quando adicionamos mais elétrons ao sistema.

Como vemos na figura (2), o Princípio de Exclusão de Pauli tem efeitos importantes, na medida em que dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente. Dois elétrons podem ocupar o mesmo nível de energia, porém seus números quânticos não são exatamente iguais. Que diferenças há nos casos considerados? Você pode identificá-las? (Problema 5). Interprete os resultados apresentados na figura (2) à luz do Princípio de Exclusão de Pauli. O que você pode concluir deste estudo?

Problemas

1. Lembrando que a equação de Schrödinger de um corpo sob a ação de um potencial $V(\mathbf{r},t)$ pode ser escrita de forma geral como:

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V\left(\mathbf{r},t\right)\right]\Psi\left(\mathbf{r},t\right)=i\hbar\frac{\partial\Psi\left(\mathbf{r},t\right)}{\partial t}$$

obtenha a expressão matemática do operador Hamiltoniano $H(1,2)$.

2. Mostre que, dada a solução da equação (5),

$$\Psi(1,2) = A\psi(1,2) + B\psi(2,1)$$

$A = \pm B$.

3. Uma partícula de massa m é *confinada* em uma linha unidimensional de comprimento L. Use argumentos baseados na interpretação ondulatória da matéria para mostrar que a energia da partícula pode assumir somente valores discretos e que esta energia é dada por $E_n = n^2 (h^2/8mL^2)$, com n = 1,2,3,...
4. A figura (1) apresenta distintas soluções para o problema de partícula-única confinada em uma caixa unidimensional. Interprete o resultado da figura (1) à luz do Princípio de Exclusão de Pauli.
5. Como vemos na figura (2), o Princípio de Exclusão de Pauli tem efeitos quânticos importantes, na medida em que dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente. Dois elétrons podem ocupar o mesmo nível de energia, porém seus números quânticos não são exatamente iguais. Que diferenças há nos casos considerados? Você pode identificá-las? Interprete estes resultados apresentados na figura (2) à luz do Princípio de Exclusão de Pauli. O que você pode concluir deste estudo?

6. É possível afirmar, à luz destes resultados, que o Princípio de Pauli tem o efeito de aumentar a energia do estado fundamental de um sistema de muitos elétrons?
7. Calcule os três primeiros níveis de energia para elétrons não interagentes em um poço quadrado infinito de comprimento 6 Å.
8. Quais são os valores das energias dos fótons que são emitidos quando o sistema de 4 elétrons mostrado na figura retorna para seu estado fundamental? Solução 3,12eV, 5,20eV e 8,32eV.