

2-Massas, 2-Poços; 2-Massas, 1-Poço;
2-Elétrons, 2-Poços; 2-Elétrons, 1-Poço

Prof. Dr. Cássio Sanguini Sergio

Departamento de Física, Universidade Federal de Roraima

Boa Vista, 20 de fevereiro de 2020

Conteúdo

1) Introdução	1
2) A linguagem e notação	2
3) 2-Massas, 2-Poços	4
4) 2-Massas, 1-Poço	8
5) 2-Elétrons, 2-Poços	10
6) 2-Elétrons, 1-Poço	11
6.1) Ao anexar o spin	16

1) Introdução

O poço quântico infinito é uma criação imaginária que apresenta solução analítica. Por isso é um objeto didático valioso. O livro (Robinett, 2006) dedica 3 capítulos sobre o tema. Pode-se explicar conceitos de mecânica quântica usando o poço infinito como exemplo.

Este artigo analisa 4 situações de 2-partículas confinadas em poços infinitos (ver o título). Em cada caso, conceitos que fundamentam a mecânica quântica são abordados, sendo os principais: partícula não-interativa, estado degenerado, partícula idêntica (férnion e bóson).

Durante a construção das ideias, o estudo desconsidera o spin e focaliza no comportamento espacial da função de onda de 2-partículas (construção e visualização). Apenas na última parte, mostra-se a importância de se anexar o spin ao problema de 2-elétrons.

2) A linguagem e notação

Trabalhar com 2-partículas e 2-poços exige linguagem e notação detalhada para se entender equações e interpretar resultados.

Sobre a extensão dos poços:

$a, b \leftarrow$ extremidades de poço;

$\ell = b - a \leftarrow$ largura de poço;

$a_1, b_1 \leftarrow$ extremidades do poço (1);

$\ell_1 = b_1 - a_1 \leftarrow$ largura do poço (1);

$a_2, b_2 \leftarrow$ extremidades do poço (2);

$\ell_2 = b_2 - a_2 \leftarrow$ largura do poço (2).

Sobre as funções de estado:

$\varphi^{(1)} \leftarrow$ partícula (1) em estado de poço;

$\varphi^{(1:\ell_1)} \leftarrow$ partícula (1) em estado do poço (1);

$\varphi_n^{(1:\ell_1)} \leftarrow$ partícula (1) no estado (n) do poço (1);

$\varphi_\eta^{(1:\ell_1)} \leftarrow$ partícula (1) no estado (η) do poço (1);

$\varphi_n^{(2:\ell_2)} \leftarrow$ partícula (2) no estado (n) do poço (2);

$\varphi_\eta^{(2:\ell_2)} \leftarrow$ partícula (2) no estado (η) do poço (2).

Sobre as posições:

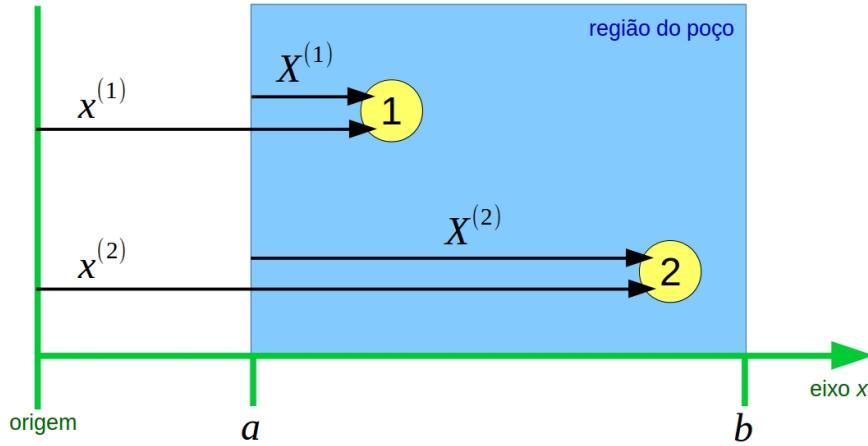


Figura 1: Posições da partícula (1) e da partícula (2).

$X \leftarrow$ posição de partícula *dentro de poço*;

$X^{(1)} \leftarrow$ posição da partícula (1) dentro de poço;

$X^{(2)} \leftarrow$ posição da partícula (2) dentro de poço;

$x \leftarrow$ posição geral de partícula pelo eixo x ;

$x^{(1)} \leftarrow$ posição geral da partícula (1) pelo eixo x ;

$x^{(2)} \leftarrow$ posição geral da partícula (2) pelo eixo x .

A Figura 1 estabelece a relação entre a posição geral e a posição dentro do poço:

$$x = a + X. \quad (1)$$

A variável x , parte da origem, corta a região do poço, e avança interminavelmente. De acordo com a equação (1), quando $x = a$, tem-se $X = 0$, e tem-se $X = b - a$, quando $x = b$. Então, comprehende-se que o intervalo de atuação da variável X é:

$$0 \leq X \leq \ell, \quad (2)$$

ou seja, a variável X tem origem na *extremidade esquerda* do poço. Por exemplo, para um poço de largura $\ell = 100$ (unidades), X vai percorrer de 0 até 100, e $X = 50$ vai significar um partícula no meio do poço.

Substituindo (1) em (2), chega-se ao óbvio: *Dentro do poço*, a variável x assume os valores:

$$a \leq x \leq b. \quad (3)$$

Sobre as soluções do poço infinito:

Livros básicos de Mecânica Quântica trazem a solução do poço quântico infinito. Aqui vamos reproduzir o resultado de (Zettilli, 2009) adaptado à nossa linguagem e notação.

A função de onda de energia no espaço de posição somente é definida dentro do poço, fora, seu valor é zero:

$$\varphi_n^{(i:\ell_j)} = \sqrt{\frac{2}{\ell_j}} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell_j} X^{(i)}\right), \quad 0 \leq X^{(i)} \leq \ell_j. \quad (4)$$

Segundo a definição (1),

$$X^{(i)} = x^{(i)} - a_j, \quad (5)$$

então, pode-se reescrever (4) como:

$$\begin{aligned} \varphi_n^{(i:\ell_j)} &= \sqrt{\frac{2}{\ell_j}} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell_j} (x^{(i)} - a_j)\right), & a_j \leq x^{(i)} \leq b_j, \\ &= 0, & x^{(i)} < a_j \text{ e } x^{(i)} > b_j. \end{aligned} \quad (6)$$

Nas equações (4) – (6), o rótulo de partícula é $i = 1, 2$; e o rótulo de poço é $j = 1, 2$.

3) 2-Massas, 2-Poços

O primeiro sistema que vamos estudar é ilustrado na Figura 2: A partícula (1) se encontra no poço (1), e a partícula (2), no poço (2). A massa da partícula (1) é m_1 , e da partícula (2), m_2 . As massas são diferentes: $m_2 > m_1$.

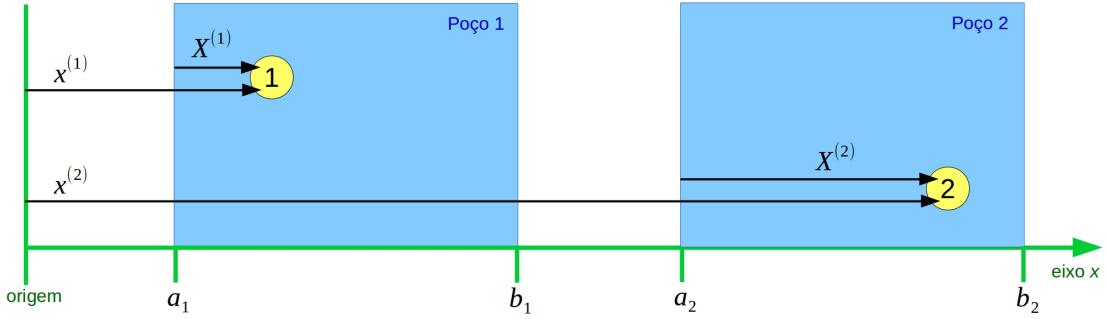


Figura 2: Partícula (1), no poço (1), e partícula (2), no poço (2).

A função de estado da partícula (1) é:

$$\begin{aligned}\varphi_n^{(1:\ell_1)} &= \sqrt{\frac{2}{\ell_1}} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell_1}(x^{(1)} - a_1)\right), & a_1 \leq x^{(1)} \leq b_1, \\ &= 0, & x^{(1)} < a_1 \text{ e } x^{(1)} > b_1,\end{aligned}\quad (7)$$

e da partícula (2):

$$\begin{aligned}\varphi_\eta^{(2:\ell_2)} &= \sqrt{\frac{2}{\ell_2}} \sin\left(\frac{\eta\pi}{\ell_2}(x^{(2)} - a_2)\right), & a_2 \leq x^{(2)} \leq b_2, \\ &= 0, & x^{(2)} < a_2 \text{ e } x^{(2)} > b_2.\end{aligned}\quad (8)$$

A função de estado do sistema de 2-partículas é obtida pelo produto das funções de 1-partícula, quer dizer, fazendo a multiplicação das equações (7) e (8):

$$\Psi_{n,\eta}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)} = \varphi_n^{(1:\ell_1)} \varphi_\eta^{(2:\ell_2)}. \quad (9)$$

Explicitamente:

$$\Psi_{n,\eta}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)} = \frac{2}{\sqrt{\ell_1 \ell_2}} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell_1}(x^{(1)} - a_1)\right) \sin\left(\frac{\eta\pi}{\ell_2}(x^{(2)} - a_2)\right). \quad (10)$$

A probabilidade (por unidade de área) da partícula (1) estar na posição $x^{(1)}$ e da partícula (2) estar na posição $x^{(2)}$ é:

$$\left| \Psi_{n,\eta}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)} \right|^2 = \frac{4}{\ell_1 \ell_2} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{\ell_1} (x^{(1)} - a_1) \right) \sin^2 \left(\frac{\eta\pi}{\ell_2} (x^{(2)} - a_2) \right). \quad (11)$$

A densidade de probabilidade (11), no caso da partícula (1) estar no estado fundamental ($n = 1$) e também a partícula (2) estar no estado fundamental ($\eta = 1$), é:

$$\left| \Psi_{1,1}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)} \right|^2 = \frac{4}{\ell_1 \ell_2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{\ell_1} (x^{(1)} - a_1) \right) \sin^2 \left(\frac{\pi}{\ell_2} (x^{(2)} - a_2) \right). \quad (12)$$

A densidade de probabilidade (12) é apresentada na Figura 3: Não se usou a constante $\frac{4}{\ell_1 \ell_2}$, e os valores que dimensionam os poços são arbitrários, $a_1 = 2$, $b_1 = 5$, $a_2 = 6$, $b_2 = 9$, o que implica em $\ell_1 = \ell_2 = 3$.

A inspeção da Figura 3 mostra o óbvio: fora das regiões dos poços, a densidade de probabilidade é zero. Por exemplo, $\left| \Psi_{1,1}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)}(3,3) \right|^2 = 0$, pois, ainda que a partícula (1) possa ocupar a posição $x^{(1)} = 3$, a partícula (2) não pode ser encontrada em $x^{(2)} = 3$, fora de seu poço de barreiras infinitas. O pico de probabilidade ocorre em $x^{(1)} = 3,5$ e $x^{(2)} = 7,5$; o que significa encontrar a partícula (1) no centro do poço (1) e a partícula (2) no centro do poço (2).

O primeiro estado excitado depende das massas, como fizemos $m_2 > m_1$, e pelo fato da energia se inversamente proporcional à massa, ele acontece quando a partícula (1) está no estado fundamental ($n = 1$) e a partícula (2) está no primeiro estado excitado ($\eta = 2$):

$$\left| \Psi_{1,2}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)} \right|^2 = \frac{4}{\ell_1 \ell_2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{\ell_1} (x^{(1)} - a_1) \right) \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\ell_2} (x^{(2)} - a_2) \right). \quad (13)$$

A densidade de probabilidade (13) é apresentada na Figura 4. Ocorrem 2 picos de probabilidade: o primeiro em $x^{(1)} = 3,5$ e $x^{(2)} = 6,75$; e o segundo em $x^{(1)} = 3,5$ e $x^{(2)} = 8,25$. Como se vê, a partícula (2) não pode ser encontrada no meio de seu poço, pois a densidade de probabilidade é zero em $x^{(2)} = 7,5$.

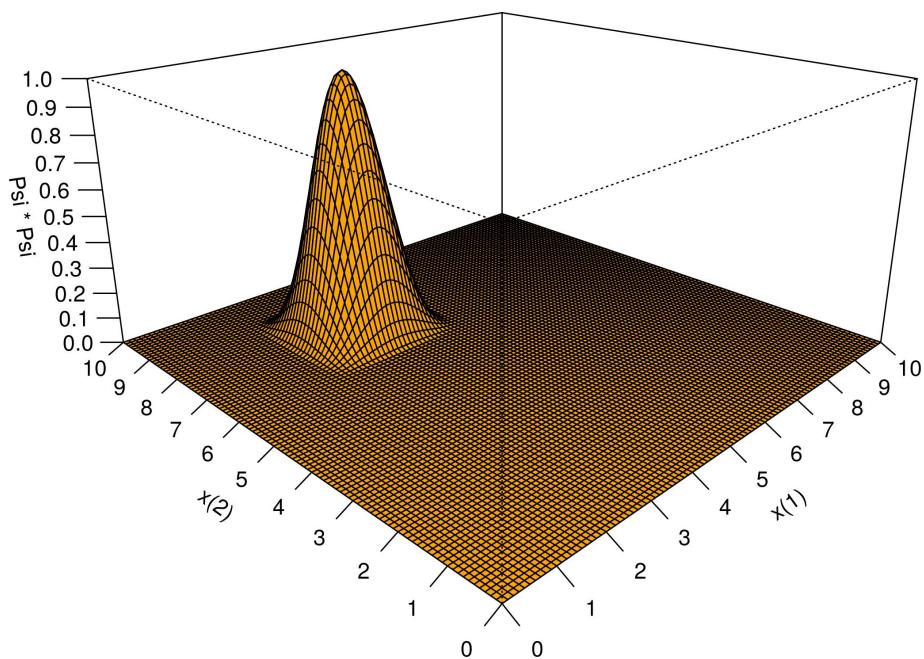


Figura 3: 2-Massas, 2-Poços: Densidade de probabilidade do estado fundamental.

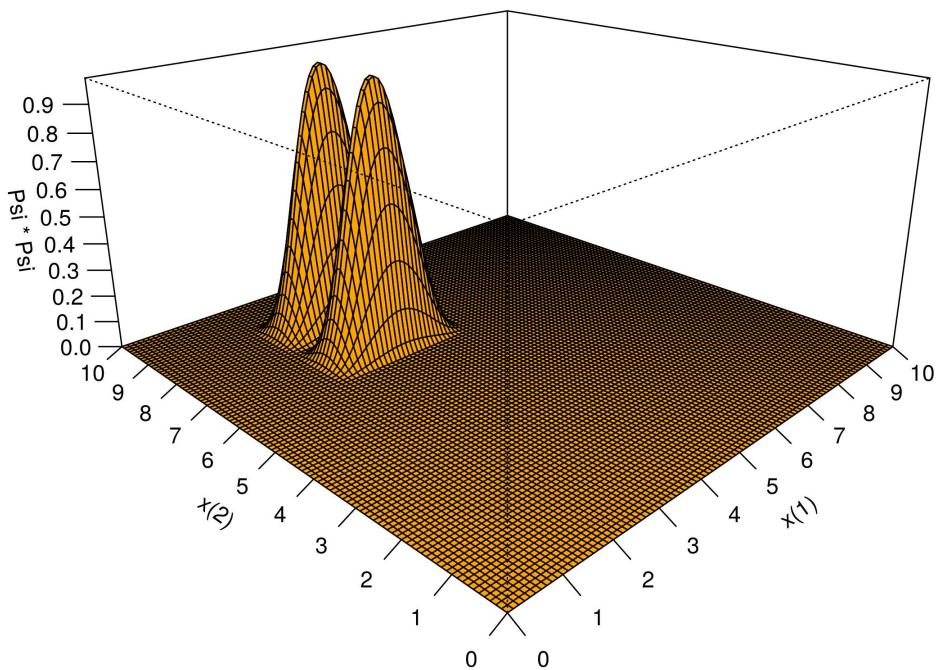


Figura 4: 2-Massas, 2-Poços: Densidade de probabilidade do primeiro estado excitado.

4) 2-Massas, 1-Poço

Vamos agora situar as 2-partículas ($m_2 > m_1$) em um mesmo poço. O sistema que vamos estudar é ilustrado na Figura 1:

$a_1 = a_2 = a \leftarrow$ extremidade esquerda do poço;

$b_1 = b_2 = b \leftarrow$ extremidade direita do poço;

$\ell_1 = \ell_2 = \ell \leftarrow$ largura do poço.

Vamos também colocar a extremidade esquerda do poço na origem do eixo x : $a = 0$.

As funções de 1-partícula (7) e (8), a função de 2-partículas (10) e sua densidade de probabilidade (11), passam a ser escritas como:

$$\begin{aligned} \varphi_n^{(1:\ell)} &= \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell}x^{(1)}\right), & 0 \leq x^{(1)} \leq \ell, \\ &= 0, & x^{(1)} < 0 \text{ e } x^{(1)} > \ell, \\ \varphi_\eta^{(2:\ell)} &= \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin\left(\frac{\eta\pi}{\ell}x^{(2)}\right), & 0 \leq x^{(2)} \leq \ell, \\ &= 0, & x^{(2)} < 0 \text{ e } x^{(2)} > \ell, \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{n,\eta}^{(1:\ell)(2:\ell)} &= \frac{2}{\ell} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{\eta\pi}{\ell}x^{(2)}\right), \\ |\Psi_{n,\eta}^{(1:\ell)(2:\ell)}|^2 &= \frac{4}{\ell^2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin^2\left(\frac{\eta\pi}{\ell}x^{(2)}\right). \end{aligned} \tag{15}$$

No caso das 2 partículas estarem no estado fundamental ($n = 1, \eta = 1$), a densidade de probabilidade (15) é apresentada na Figura 5: Não se usou a constante $\frac{4}{\ell^2}$, e a largura do poço é arbitrária: $\ell = 3$.

Agora, no caso da partícula (1) estar no estado fundamental ($n = 1$) e a partícula (2) no primeiro estado excitado ($\eta = 2$), a densidade de probabilidade (15) é apresentada na Figura 6.

A comparação das densidades de probabilidade do sistema (2-Massas, 1-Poço), desta seção, com as densidades de probabilidade do sistema (2-Massas, 2-Poços), da seção anterior, nos induz a pensar que os dois sistemas são iguais — porém, não são!

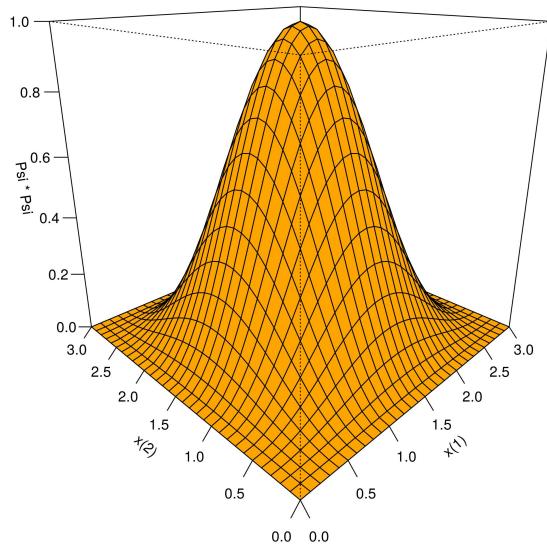


Figura 5: 2-Massas, 1-Poço: Densidade de probabilidade do estado fundamental.

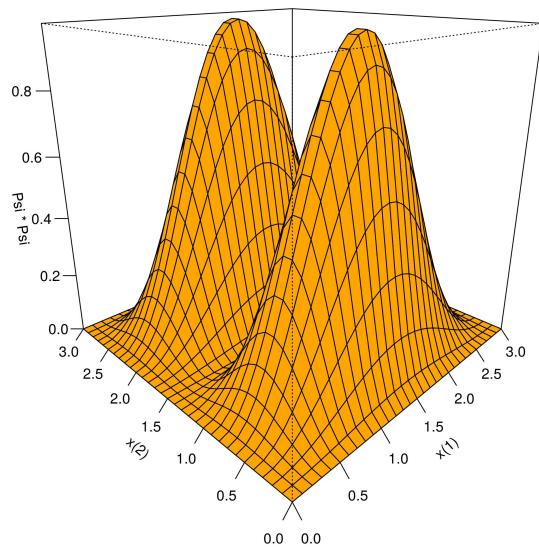


Figura 6: 2-Massas, 1-Poço: Densidade de probabilidade do primeiro estado excitado.

As partículas no sistema (2-Massas, 2-Poços) estão separadas por natureza. Uma não pode interagir com a outra, afetando ou influenciando o desenvolvimento ou a condição da outra. O sistema (2-Massas, 2-Poços) é um sistema de partículas não-interativas, por natureza. Todavia, no sistema (2-Massas, 1-Poço) as partículas se localizam no *mesmo* poço. Então, o que impede de “conversarem” ou interagirem?

— A nossa mente!

Do ponto de vista teórico, desprezamos a interação partícula-partícula. Idealizamos um sistema em que cada partícula “vive” isolada em seu *próprio* poço. Por estratégia teórica, consideramos o sistemas como um sistema de partículas não-interativas. Fazendo isso, a equação de Schrödinger de N-partículas é separada em N-equações de 1-partícula, e a função de estado de N-partículas é expressa como o produto de N-funções de estado de 1-partícula, e a energia do sistema de N-partículas é expressa como a soma de N-energias de 1-partícula:

$$\Psi(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}) = \varphi(x^{(1)}) \varphi(x^{(2)}) \cdots \varphi(x^{(N)}), \quad (16)$$

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \cdots + \varepsilon_N.$$

Em conclusão, no sistema (2-Massas, 2-Poços), as partículas *são* isoladas por natureza, entretanto, no sistema (2-Massas, 1-Poço), as partículas *estão* isoladas por estratégia teórica.

5) 2-Elétrons, 2-Poços

O sistema (2-Elétrons, 2-Poços) é um sistema de partículas isoladas fisicamente (corporalmente), não-interativas por natureza. À primeira vista, pode-se pensar que ele é igual ao sistema (2-Massas, 2-Poços) — porém, não é! No sistema (2-Massas, 2-Poços) as massas são diferentes: $m_2 > m_1$. No sistema (2-Elétrons, 2-Poços) as massas são iguais: a massa de repouso do elétron é $m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$.

As massas serem iguais não afeta a estrutura do estado fundamental. A Figura 3 também representa a densidade de probabilidade do estado fundamental do sistema (2-Elétrons, 2-Poços). Mas afeta a estrutura do primeiro estado excitado. O primeiro estado excitado do sistema (2-Elétrons, 2-Poços) é degenerado. Em

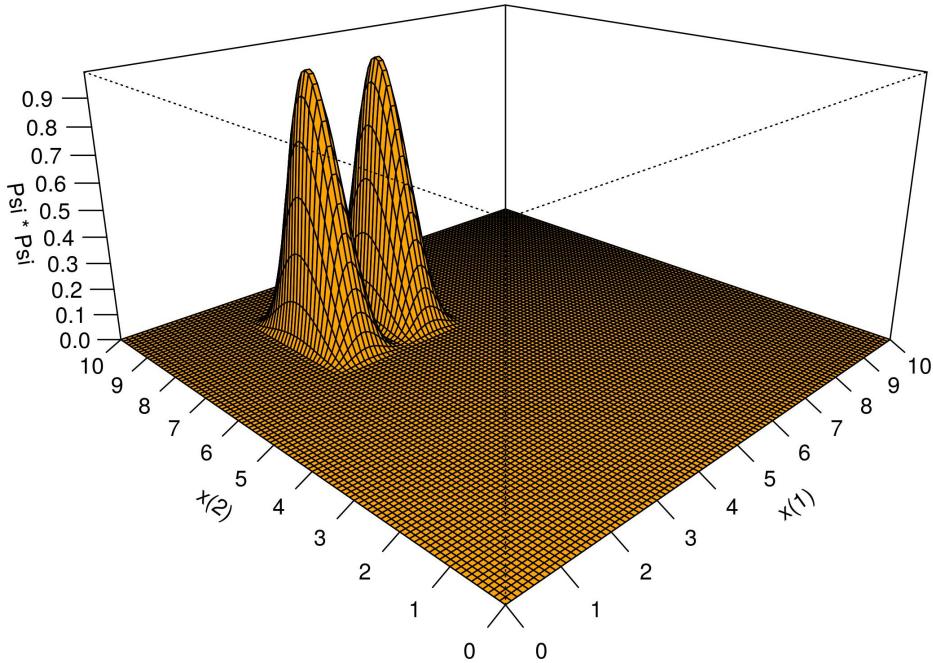


Figura 7: 2-Elétrons, 2-Poços: Uma das densidade de probabilidade do primeiro estado excitado.

termos de energia, estar o elétron (1) no estado fundamental ($n = 1$) e o elétron (2) no primeiro estado excitado ($\eta = 2$), ou, estar o elétron (1) no primeiro estado excitado ($n = 2$) e o elétron (2) no estado fundamental ($\eta = 1$), não há diferença, quer dizer, $\Psi_{1,2}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)}$ e $\Psi_{2,1}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)}$ são estados de mesma energia.

A Figura 7 mostra a densidade de probabilidade do estado $\Psi_{2,1}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)}$, compare com a densidade de probabilidade do estado $\Psi_{1,2}^{(1:\ell_1)(2:\ell_2)}$ — impressa na Figura 4. Como se vê na 7, agora é a partícula (1) que não pode ser encontrada no meio de seu poço, pois a densidade de probabilidade é zero em $x^{(1)} = 3,5$ — na Figura 4, é a partícula (2) que não pode ser encontrada no meio de seu poço.

6) 2-Elétrons, 1-Poço

O sistema (2-Elétrons, 1-Poço) é um sistema de partículas interativas. A interação elétron-elétron é do tipo Coulombiana. No nosso caso, que é um caso unidimensional, a repulsão elétron-elétron se escreve:

$$V = \frac{e^2}{|x^{(1)} - x^{(2)}|}. \quad (17)$$

Negligenciando (17), pode-se considerar os elétrons como partículas não-interativas (por estratégia teórica, não por natureza).

À primeira vista, pode-se pensar que o sistema (2-Elétrons, 1-Poço) seja direfente do sistema (2-Massas, 1-Poço) apenas na questão das massas, e que a equação (15) ainda é válida. Entretanto, há um novo fator:

— **Elétrons são partículas idênticas.**

Partículas (*i*) com massas m_i são partículas distinguíveis.

Elétrons (*i*) com massas $m_i = m_e$ são partículas indistinguíveis (idênticas): Colocados em poços diferentes (V_i) são partículas distinguíveis, mas, colocados em um mesmo poço ($V_i = V_1$) são partículas idênticas. Por isso, no caso da seção anterior, foram considerados partículas distinguíveis, no caso desta seção, serão tratados como partículas idênticas.

Um sistema de partículas *distinguíveis* possui função de estado do tipo (16), mas, um sistema de partículas idênticas, *não*.

A função de estado de um sistema de partículas idênticas precisa ser simétrica ou antissimétrica:

Função simétrica \leftarrow Se ocorrer o intercâmbio de um par de partículas, o sinal da função *não troca* de sinal;

Função antissimétrica \leftarrow Se ocorrer o intercâmbio de um par de partículas, o sinal da função *troca* de sinal.

Sobre a notação, será empregado “*s*” para indicar a função de estado simétrica e “*a*” para indicar a antissimétrica:

$\Psi_{n,\eta}^s \leftarrow$ função de estado simétrica;

$\Psi_{n,\eta}^a \leftarrow$ função de estado antissimétrica.

Partículas idênticas que possuem spin meio-inteiro são denominadas férmions, as que possuem spin inteiro, bôsons. Um sistema de férmions é representado por

função de estado antissimétrica, um sistema de bósons, por função de estado simétrica:

- **Elétrons são partículas idênticas que possuem spin meio-inteiro: são férmiões;**
- **Um sistema de elétrons é representado por função de estado antissimétrica.**

A função antissimétrica pode ser construída com o auxílio do determinante de Slater (Zettilli, 2009). Para um sistema com 2-elétrons, o resultado é:

$$\Psi_{n,\eta}^a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_n^{(1:\ell)} \varphi_\eta^{(2:\ell)} - \varphi_\eta^{(1:\ell)} \varphi_n^{(2:\ell)}). \quad (18)$$

Vendo (18) é fácil de descobrir que a função simétrica é do seguinte modo:

$$\Psi_{n,\eta}^s = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_n^{(1:\ell)} \varphi_\eta^{(2:\ell)} + \varphi_\eta^{(1:\ell)} \varphi_n^{(2:\ell)}). \quad (19)$$

Descarregando as soluções do poço infinito em (18), a função antissimétrica tem a feição:

$$\Psi_{n,\eta}^a = \frac{\sqrt{2}}{\ell} \left[\sin\left(\frac{n\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{\eta\pi}{\ell}x^{(2)}\right) - \sin\left(\frac{\eta\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{n\pi}{\ell}x^{(2)}\right) \right]. \quad (20)$$

A função (20) é uma função *espacial*. Sobre os valores de $x^{(1)}$ e $x^{(2)}$, deve-se lembrar que os 2-elétrons estão confinados em um poço de extensão ℓ , então, eles podem ser encontrados dentro do mesmo intervalo: $(0 \leq x^{(1)} \leq \ell)$; $(0 \leq x^{(2)} \leq \ell)$.

A função (20) para o estado fundamental ($n = 1, \eta = 1$) é:

$$\Psi_{1,1}^a = \frac{\sqrt{2}}{\ell} \left[\sin\left(\frac{\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{\pi}{\ell}x^{(2)}\right) - \sin\left(\frac{\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{\pi}{\ell}x^{(2)}\right) \right]. \quad (21)$$

É óbvio que (21) não existe: A função espacial antissimétrica para o estado fundamental é nula.

A função (20) para o primeiro estado excitado ($n = 1, \eta = 2$) *não é toda nula*:

FUNÇÃO ANTISSIMÉTRICA

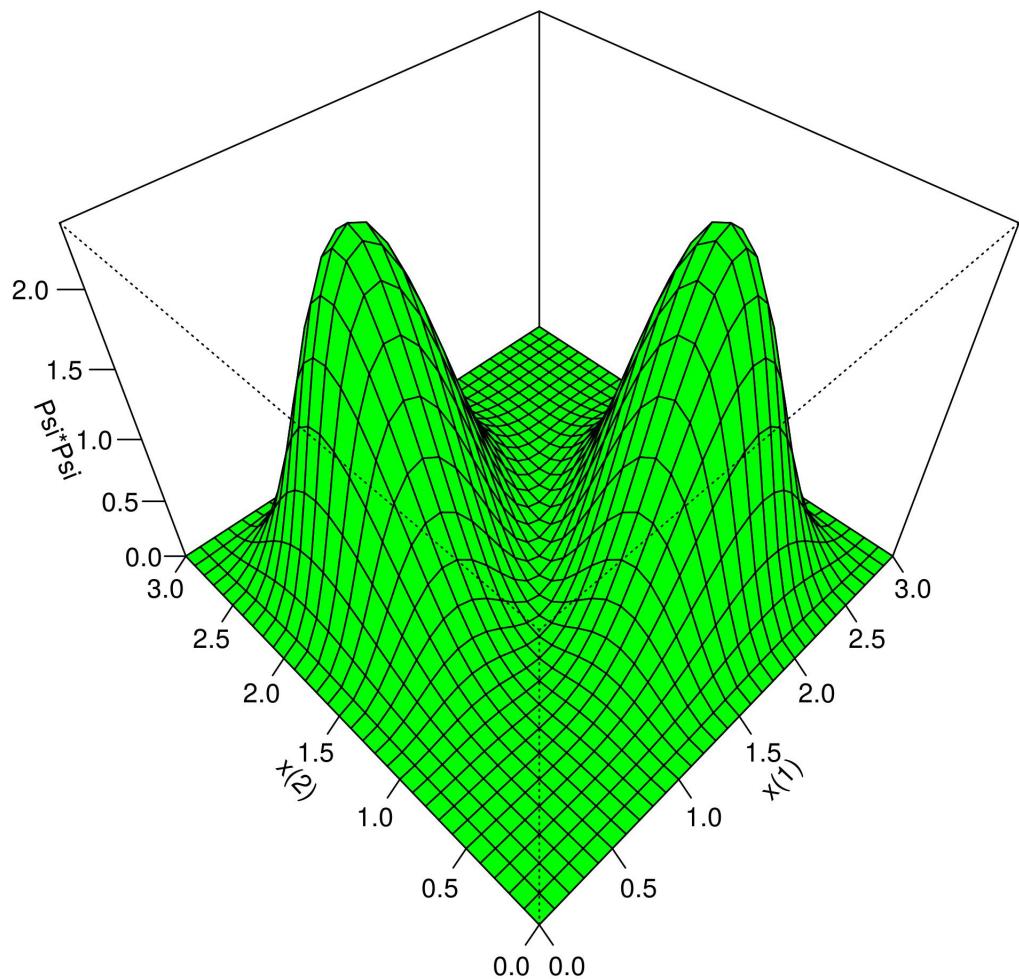


Figura 8: 2-Elétrons, 1-Poço: Densidade de probabilidade do primeiro estado excitado.

FUNÇÃO SIMÉTRICA

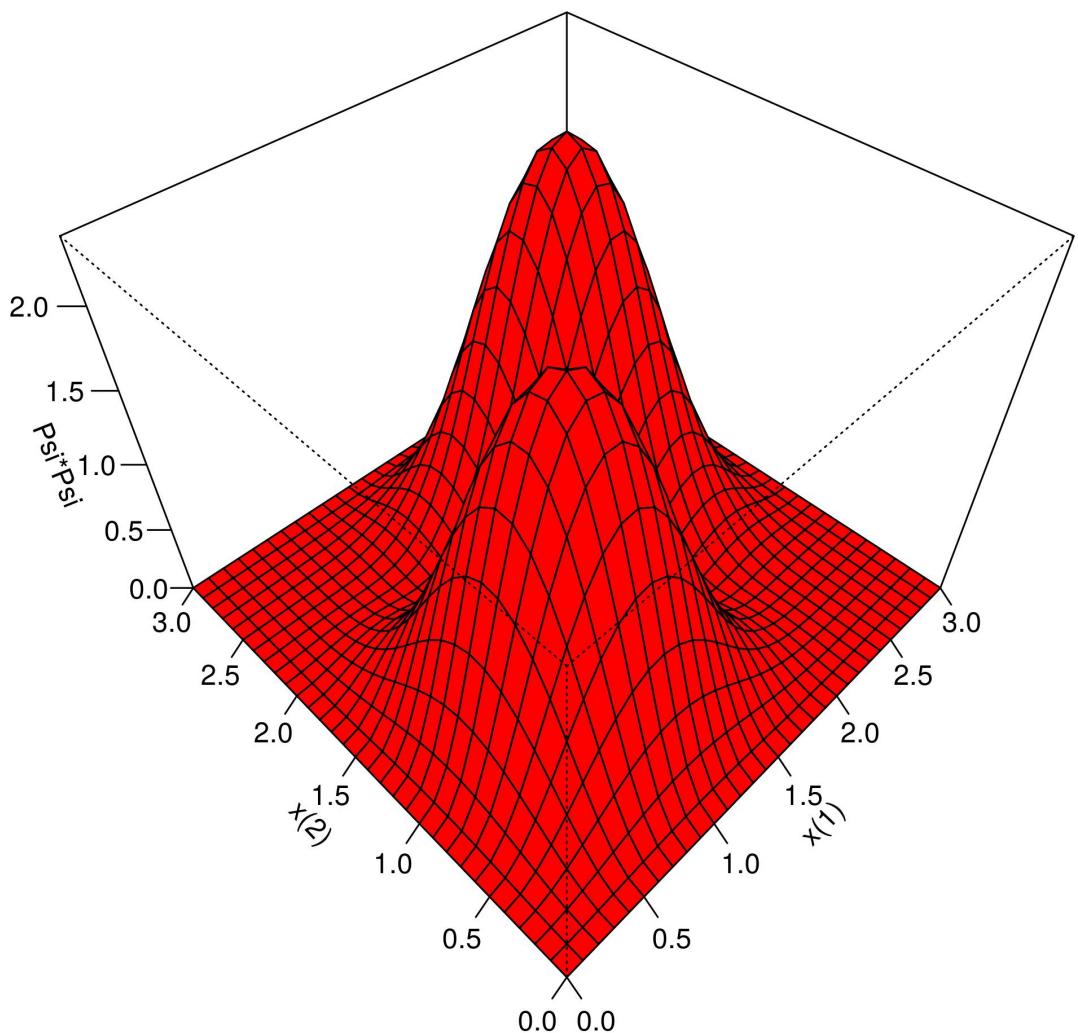


Figura 9: Densidade de probabilidade de sistema com 2-bósons (equivalente simétrico da Figura 8).

$$\Psi_{1,2}^a = \frac{\sqrt{2}}{\ell} \left[\sin\left(\frac{\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{\ell}x^{(2)}\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{\pi}{\ell}x^{(2)}\right) \right]. \quad (22)$$

A função espacial simétrica equivalente à (22) é:

$$\Psi_{1,2}^s = \frac{\sqrt{2}}{\ell} \left[\sin\left(\frac{\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{\ell}x^{(2)}\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{\ell}x^{(1)}\right) \sin\left(\frac{\pi}{\ell}x^{(2)}\right) \right]. \quad (23)$$

As densidades de probabilidade $|\Psi_{1,2}^a|^2$ e $|\Psi_{1,2}^s|^2$ são apresentadas nas Figuras 8 e 9, respectivamente: Não se usou a constante $\frac{2}{\ell^2}$, e a largura do poço é arbitrária: $\ell = 3$.

A figura antissimétrica (8) apresenta pontos com densidade de probabilidade nula. Por exemplo, o resultado da equação (22) para $x^{(1)} = x^{(2)} = 2$ e $\ell = 3$ é:

$$\Psi_{1,2}^a(2, 2) = \frac{\sqrt{2}}{\ell} \left[\sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) \sin\left(\frac{4\pi}{3}\right) - \sin\left(\frac{4\pi}{3}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) \right] = 0. \quad (24)$$

Generalizando, a reta $x^{(1)} = x^{(2)}$ apresenta densidade de probabilidade nula:

— **O elétron (1) não ocupa o mesmo espaço do elétron (2).**

A situação muda quando se analisa a figura simétrica (9). Agora ocorre um pico de probabilidade em $x^{(1)} = x^{(2)}$:

— **O bóson (1) ocupa o mesmo espaço do bóson (2).**

Os pontos mais prováveis de se encontrar o sistema (2-Elétrons, 1-Poço) são $[x^{(1)} = 0,9; x^{(2)} = 2,1]$ e $[x^{(1)} = 2,1; x^{(2)} = 0,9]$, que correspondem aos picos da Figura (8). Como se vê, os elétrons preferem ficar em lugares opostos.

6.1) Ao anexar o spin...

O artigo “Multipletos de (2,3)-Spins-1/2” trata do acoplamento de (2,3)-spins-1/2. O acoplamento de 2-spins-1/2 dá origem a um tripleto e a um singuleto (ver as expressões em [https://sites.google.com/view/cassiofisica/página-inicial](https://sites.google.com/view/cassiofisica/p%C3%A1gina-inicial)).

A estrutura do tripleto é simétrica, e a do singuleto é antissimétrica.

Este artigo mostrou que a função espacial antissimétrica do sistema (2-Elétrons, 1-Poço), estado fundamental, é nula — ver (21). Isso não quer dizer que não exista o estado fundamental para o sistema de 2-elétrons. Quer dizer, apenas, que falta acrescentar o spin no problema.

Constrói-se uma função antissimétrica multiplicando uma função espacial simétrica com uma função de spin antissimétrica.

Ao tratar o estado fundamental ($n = 1, \eta = 1$), a função antissimétrica é construída pela multiplicação da função espacial (19) (simétrica) com a função singlet (antissimétrica):

$$\Psi_{1,1}^a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)} + \varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)}) * \text{singlet.} \quad (25)$$

Resolvendo dentro dos parênteses:

$$\Psi_{1,1}^a = \frac{2}{\sqrt{2}} * \varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)} * \text{singlet.} \quad (26)$$

No estado com 2-spins-1/2 acoplados resultando em spin total zero (singlet), o spin do elétron (1) está ao contrário do spin do elétron (2), por exemplo, um está para cima e outro, para baixo.

O coeficiente $\varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)}$ pode ser interpretado como amplitude de probabilidade do estado singlet, ou seja, $|\varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)}|^2$ é a probabilidade (por unidade de área) de achar o sistema no estado singlet.

O perfil da densidade de probabilidade $|\varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)}|^2$ é apresentado na Figura 5: A reta $x^{(1)} = x^{(2)}$ apresenta densidade de probabilidade *não-nula*.

Ao anexar o spin, o que parecia impossível (elétrons ocuparem o mesmo espaço), passa a ter probabilidade de ocorrer. Quando os elétrons estão com a mesma energia ($n = 1, \eta = 1$), o elétron (1), na posição $x^{(1)}$, se acopla (via spin) com elétron (2), na posição $x^{(2)} = x^{(1)}$, e formam um sistema com spin total zero:

— O elétron (1), com spin contrário ao outro, ocupa o mesmo espaço do outro.

Também constrói-se uma função antissimétrica multiplicando uma função espacial antissimétrica com uma função de spin simétrica.

Ao tratar o primeiro estado excitado ($n = 1, \eta = 2$), a função antissimétrica é construída pela multiplicação da função espacial (18) (antissimétrica) com a função triplexo (simétrica):

$$\Psi_{1,2}^a = \frac{1}{\sqrt{2}} * \left(\varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_2^{(2:\ell)} - \varphi_2^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)} \right) * \text{triplexo.} \quad (27)$$

No estado com 2-spins-1/2 acoplados resultando em spin total 1 (triplexo), há uma configuração em que os 2-spins estão para cima, e há outra, em que os 2-spins estão para baixo.

Interpreta-se que $\left| \left(\varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_2^{(2:\ell)} - \varphi_2^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)} \right) \right|^2$ é a probabilidade (por unidade de área) de achar o sistema no estado triplexo.

O perfil da densidade de probabilidade $\left| \left(\varphi_1^{(1:\ell)} \varphi_2^{(2:\ell)} - \varphi_2^{(1:\ell)} \varphi_1^{(2:\ell)} \right) \right|^2$ é apresentado na Figura 8: O elétron (1) não ocupa o mesmo espaço do elétron (2), ocupa um espaço distante.

Ao anexar o spin ao caso dos elétrons que não possuem a mesma energia ($n = 1, \eta = 2$), o elétron (1), na posição $x^{(1)}$, se acopla (via spin) com elétron (2), na posição $x^{(2)} \neq x^{(1)}$, e formam um sistema com spin total 1:

— **O elétron (1), com o mesmo spin do outro, não ocupa o mesmo espaço do outro, se distancia do outro.**

Referências

Robinett, R. W. (2006). *Quantum Mechanics: Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples*. Oxford University Press , ISBN 978-0-19-853097-8, 2nd edition.

Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics Concepts and Applications*. John Wiley and Sons, Ltd. , ISBN 978-0-470-02678-6, 2nd edition.