

FISICA MODERNA

Nelson Zamorano H.

Departamento de Física

Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas

Universidad de Chile

versión 17 de noviembre de 2008

Índice general

VII Mecánica Cuántica	3
VII.1. Interacción de la luz con la materia	3
VII.2. Una nueva constante universal: \hbar	3
VII.2.1. Radiación de cuerpo negro	4
VII.3. Teoría de Rayleigh-Jeans	9
VII.4. Max Planck y los cuantos de energía	14
VII.4.1. La distribución de Maxwell-Boltzmann	14
VII.4.2. La hipótesis de Max Planck	15
VII.4.3. La constante de Planck y las nuevas unidades fundamentales	22
VII.4.4. El descubrimiento del electrón	23
VII.5. Efecto fotoeléctrico	25
VII.5.1. El modelo de Einstein para el efecto fotoeléctrico	28
VII.6. Efecto Compton	31
VII.7. Cronograma de la mecánica cuántica	34
VII.8. El átomo de Bohr	37
VII.8.1. Breve reseña de la historia del núcleo atómico	37
VII.8.2. Modelo atómico de Bohr	39
VII.8.3. Experimento de Frank Hertz	45
VII.8.4. Crítica al método de Bohr	46
VII.9. De Broglie: una onda asociada a cada partícula	46
VII.9.1. Paquetes de ondas	47

VII.9.2. Difracción de una Ranura	56
VII.9.3. El experimento de la doble rendija	60
VII.10 Ecuación de Schrodinger	64
VII.11 Regimen Permanente	70
VII.12 Electrones en metales	82
VII.13 Átomos con dos niveles de energía	85
VII.13.1 Álgebra, bra, ket, unidad	85
VII.14 Evolución de los estados	88
VII.14.1 Cambio de Base	91
VII.15. Partículas con Spin 1/2. Interacciones con un Campo Magnético	94
VII.15.1. Revisión de los Paréntesis de Poisson	94
VII.15.2 Nueva revisión del sistema con dos niveles de energía	96
VII.16 Perturbaciones dependientes del tiempo. Sistemas con dos niveles	106
VII.17 Ejercicios	111

Capítulo VII

Mecánica Cuántica

VII.1. Interacción de la luz con la materia

A fines del siglo XIX se realizaron una serie de experimentos cuyos resultados no podían ser explicados dentro del marco de la física de aquella época.

La mecánica cuántica se estableció en un período de alrededor de 25 años, entre 1900 y 1926, y fue el marco teórico que logró dar una respuesta coherente a una serie de experimentos cuyos resultados no encontraban un sentido en el paradigma de la física clásica.

Un ejemplo de estos experimentos es el intento de comprender la interacción de la luz con la materia en el contexto de la física clásica. El proceso inverso, la emisión de luz por la materia, un medio gaseoso o sólido, literalmente exhibía propiedades inesperadas y que no cabían dentro de la física de época.

El experimento que marca la aparición de una nueva constante universal, que hoy conocemos como la constante de Planck y se designa como $\hbar = h/2\pi$ es el hito histórico. Obviamente, en su primera aparición no se llamó así ni tampoco su creador, **Max Planck**, cayó en la cuenta de la magnitud de su hallazgo. Sólo hoy, mirando en perspectiva podemos valorar su real importancia.

VII.2. Una nueva constante universal: \hbar .

Éste consistía en medir, a través de un pequeño orificio practicado en una de las paredes de una caja, el espectro de la emisión que surgía de su interior. Esta caja permanecía en equilibrio termodinámico con su entorno. El tamaño del orificio a través del cual se mide la emisión debe ser pequeño para que la radiación electromagnética que surge a través de él, haya efectivamente interactuado con las paredes del recipiente (la caja) y su constitución refleje esta interacción. De otra forma la emisión podría contener radiación que sólo se reflejó una sola vez en la pared

del recipiente.

VII.2.1. Radiación de cuerpo negro

El experimento que originó esta revolución fue el espectro de emisión generado por lo que se denomina un cuerpo negro. simplemente un rayo que penetró por el orificio y se reflejó directamente hacia el exterior. Si alguno penetra debe ser absorbido y re-emitido muchas veces en el interior del recipiente, antes de escapar. En otras palabras, hay una pérdida de información en cuanto a las características del rayo que penetró. La radiación que se mide desde el exterior *olvidó* las características que tenía al incidir.

El problema consistía en explicar el espectro de emisión observado a partir de las leyes válidas hasta ese entonces: las ecuaciones de Maxwell, la termodinámica y un modelo simple que describía la emisión de ondas electromagnéticas por parte de las paredes del recipiente.

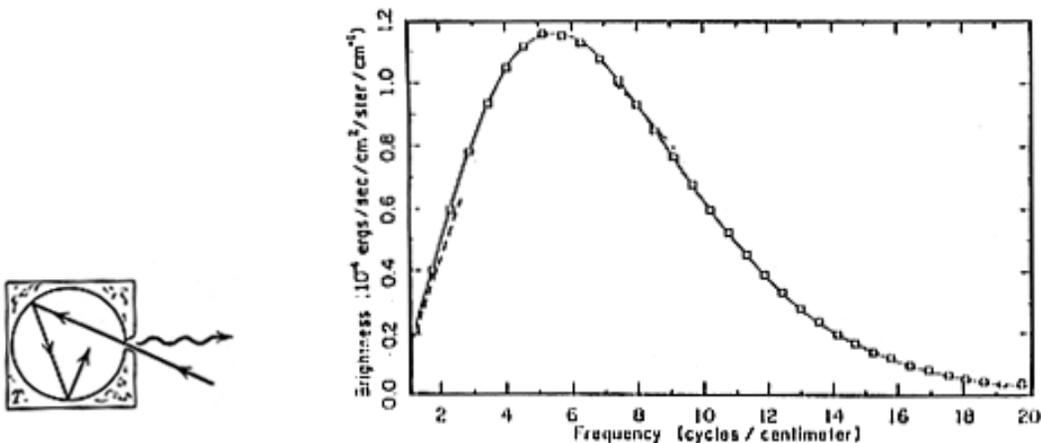


Figura VII.1:

Lo más importante en este caso es que la radiación emitida era universal, dependía solamente de la temperatura de las paredes del contenedor y no de la naturaleza de ellas. El gráfico que se incluye a continuación proviene del espectro de la radiación de fondo medido por el satélite científico **Cobe** y que midió la distribución de energía del remanente de radiación que se desligó (o dejó de interactuar) de la materia en los comienzos del universo. Este espectro queda especificado por los mismos principios que son aplicados a un cuerpo negro de forma esférica y de un material cualquiera.

Equilibrio termodinámico

Supongamos que la cavidad está vacía y sólo la componen el baño de radiación electromagnética en equilibrio con las paredes del recipiente.

¿Cómo se alcanza el equilibrio térmico entre las paredes del recipiente y las ondas electromagnéticas en su interior?

Para responder esta pregunta debemos tener presente que:

- Cargas aceleradas emiten (radían) ondas electromagnéticas.
- El modelo de una carga sostenida mediante un resorte y oscilando representa en forma razonable el comportamiento de los átomos del sólido.
- El equilibrio termodinámico alcanzado entre las ondas electromagnéticas y estos osciladores que representan al sólido, indica que la energía de ambos cuerpos alcanza el valor especificado por el principio de equipartición de la energía.

En resumen, la respuesta a esta pregunta es la siguiente: las ondas electromagnéticas inciden sobre los átomos en las paredes de la cavidad y éstas (modeladas por un resorte y una carga q en el extremo) radían de vuelta dicha energía a la cavidad. Pasado un cierto tiempo la cavidad y las paredes se encuentran en *equilibrio térmico*.

Equipartición de la energía

El principio de equipartición de la energía permite explicar algunos comportamientos que podrían parecer extraños. Por ejemplo, en ausencia de energía potencial una partícula puesta en medio de un gas en equilibrio a temperatura T , adquiere una energía cinética promedio igual a $(\frac{3}{2} kT)$.

$$\langle E_{cin.} \rangle = \frac{3}{2} kT.$$

Este es un hecho observable, existen innumerables otros que corroboran este principio en forma experimental. Uno de ellos es el *Ruido de Johnson*. Es sabido que cualquier sistema de detección que pretenda eliminar el ruido de fondo debe intentar mantener los instrumentos a la menor temperatura posible. A continuación se indica un modelo de un circuito resonante, donde suponemos que la radiación se realiza principalmente a través de la inductancia L .

Con los valores adecuados de L , C y $R \rightarrow 0$ se puede medir una diferencia de potencial v_L entre los extremos de la inductancia.

¿Cómo sucede esto?

$$Q \equiv 2\pi \frac{[\text{Energía almacenada}]}{[\text{Pérdida de energía / período}]},$$

con $Q \gg 1$. En equilibrio térmico la energía almacenada por la inductancia E_L es:

$$E_L = \frac{1}{2} L I^2 = \frac{1}{2} kT, \quad k = 1,38 \times 10^{-16} \left[\frac{\text{erg}}{^\circ\text{K}} \right],$$

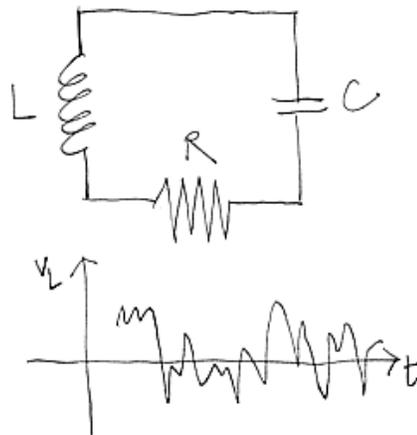


Figura VII.2:

Como $V_L = L \frac{di}{dt} = L \omega_o I(t)$. Este ruido es *medible*: $\langle V_L^2 \rangle = L^2 \omega_o^2 \langle I^2 \rangle = L \omega_o^2 k T$. Obviamente $\langle V_L \rangle = 0 = \langle I \rangle$, de otra forma tendríamos una fuente inagotable de energía gratis.

La regla indica que debemos multiplicar por un factor $k/2$, donde k indica los grados de libertad del sistema.

Este mismo principio de equipartición fue usado en el caso de un cuerpo que encierra ondas electromagnéticas en equilibrio térmico con sus paredes. Sólo que aquí el resultado obtenido *no* coincidió con los resultados experimentales.

El primer acercamiento a la mecánica cuántica lo realizó –sin proponérselo– Max Planck al inventar una fórmula que permitió resolver esta contradicción entre la teoría contemporánea y los resultados experimentales.

Radiación de cuerpo negro

Un cuerpo negro es aquel que absorbe toda la radiación que incide sobre él. En equilibrio térmico, un cuerpo que absorbe toda la radiación, la debe emitir toda, de otra forma estaría eternamente aumentando su temperatura. Esto se expresa con el coeficiente de absorción a y emisión e , que deben cumplir la relación: $e \equiv a$. Este resultado proviene de la termodinámica.

En general se identifica un cuerpo negro con una esfera hueca a la cual se le ha practicado un orificio. Esta identificación del cuerpo negro intenta ilustrar el hecho que cualquier pulso de radiación que penetre al interior de esta cavidad, debe sufrir un gran número de interacciones con las paredes del recipiente antes de poder escapar nuevamente. En el transcurso de estas interacciones alcanza el equilibrio con las paredes y, de esta forma al retornar al exterior, el pulso transmite información acerca de las paredes del recipiente y no conserva las características que traía al ingresar a la cavidad. La absorción de la radiación por las paredes aumenta al pintar el interior de negro.

La radiación emitida por un cuerpo negro es *universal*. Todos los cuerpos en *equilibrio térmico* radían una cantidad de energía por unidad de tiempo, de área y de longitud de onda λ , I_λ dependiendo *sólo* de su temperatura. No influye la forma de la cavidad ni la naturaleza del material del recipiente. La forma de la radiación térmica emitida por un cuerpo negro en función de la frecuencia –o de la longitud de onda–, fue registrada por Lummer y Pringsheim en 1899.

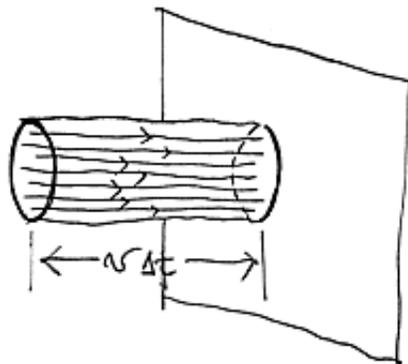


Figura VII.3:

$$I \equiv \frac{\text{Energía}}{[\text{u. de área}][\text{u. de tiempo}]},$$

$$[I_\lambda] \equiv \left[\frac{dI}{d\lambda} \right], \quad [I_\nu] \equiv \left[\frac{dI}{d\nu} \right].$$

$$I_\nu = I_\lambda \left| \left[\frac{d\lambda}{d\nu} \right] \right| = I_\lambda \frac{c}{\nu^2}.$$

Resumen de los aspectos conocidos acerca de la radiación de cuerpo negro, previos al modelo Planck

La distribución de la intensidad de la radiación en función de la longitud de onda I_λ , se caracteriza por ser:

- independiente de la forma de la cavidad,
- independiente de la naturaleza del material que constituye las paredes,
- un fenómeno genérico o universal. Como aparece de la misma forma en distintas condiciones físicas, podemos suponer que nos enfrentamos a un mecanismo básico de la naturaleza.

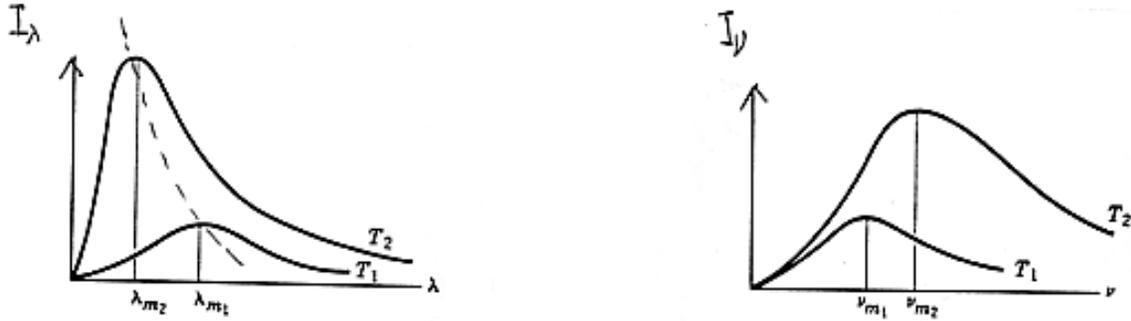
Algunos hechos empíricos y teóricos acerca de la radiación

Una relación que se dedujo a partir de la observación de la emisión de un cuerpo negro en distintas circunstancias y conocida como la ley de desplazamiento de **Wien**, fue:

$$\lambda_{max} T = 0,2898 \text{ cm}^\circ \text{ K}.$$

Este resultado se puede verificar directamente. Es probable que hayamos notado que si la temperatura de un cuerpo aumenta, se pueda apreciar que la longitud de emisión, en el rango de máxima intensidad de emisión λ_{max} , disminuya. Esto es lo que sucede al calentar un metal: mientras mayor sea su temperatura, más se aproxima su color al azul. De hecho es usual encontrar en los talleres donde se trabaja con metales una tabla que relaciona los colores de los metales con su correspondiente temperatura.

El mismo fenómeno se observa en las estrellas, mientras más azules, (o más blancas) mayor es su temperatura superficial.



Otro resultado *empírico* conocido en esa época, propuesto por Stefan a partir de los datos observacionales y que posteriormente Boltzmann dedujo a partir de los termodinámica, es la denominada ley de **Stefan-Boltzmann (1879)**:

$$I = \int I_{\lambda} \lambda = \sigma e T^4, \quad \sigma = 0,567 \times 10^{-4} \frac{\text{erg}}{\text{cm}^2 \text{o} K^4 \text{s}}.$$

El factor σ fue determinado a partir de los datos experimentales. La termodinámica sólo determina la dependencia en T^4 . El factor e indica la reflexión de la radiación en la superficie del metal. $0 \leq e \leq 1$, donde $e = 1$ indica un cuerpo negro, es decir un cuerpo que absorbe toda la radiación incidente.

Ejercicio

Encuentre la densidad de energía de un gas relativista encerrado en un recipiente a temperatura T . Se supone que el gas alcanza el equilibrio termodinámico con las paredes del recipiente.

Para encontrar este resultado use (o deduzca) la ecuación de estado de un gas relativista y la siguiente relación termodinámica ($\rho \equiv U/V$, U Energía, V volumen ocupado):

$$p = \frac{1}{3} \rho, \quad \left. \frac{\partial U}{\partial V} \right|_T = T \left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_V - p.$$

A partir de estas expresiones es posible obtener $U(T) = U_o T^4$, donde U_o es una constante indeterminada que se fija a partir de los datos experimentales.

VII.3. Teoría de Rayleigh-Jeans

Esta es una teoría clásica y describe correctamente la curva I_{λ} para bajas energías comparadas con (kT) . Calcularemos la densidad de energía de la radiación electromagnética en el interior de

una caja que permanece en equilibrio térmico a una temperatura T . Como el recipiente está en equilibrio, el número de fotones debe haber alcanzado ya un número estable (recordemos que el potencial químico es $\mu = 0$ para la radiación electromagnética, de modo que el número de fotones *no* es constante).

Sabemos que cualquier radiación y la luz en particular está constituido por ondas electromagnéticas.

Rayleigh y Jeans utilizaron esta idea para intentar reproducir el resultado experimental obtenido: el espectro de radiación emitida. Supusieron que al interior del recipiente se encontraba un conjunto de ondas estacionarias electromagnéticas y que el flujo de energía proveniente del cuerpo negro correspondía al flujo de esta radiación. Como este fenómeno es independiente de los detalles, (naturaleza de las paredes, forma de la caja ...), utilizó este hecho y procedió a emplear la geometría de un cubo metálico para resolver el problema.

A continuación nos preocuparemos sólo del comportamiento del campo eléctrico en el interior del cubo. El campo magnético puede ser descrito $\hat{n} \wedge \vec{E}$, donde \hat{n} es la dirección en que viaja la onda electromagnética. Como ésta es una onda transversal ocurre que $\hat{n} \cdot \vec{E} = 0$ y, análogamente $\hat{n} \cdot \vec{B} = 0$. También usamos el principio de superposición: resolvemos cada una de las *direcciones* x , y y z en forma independiente, el efecto total es la suma del resultado de cada una de sus componentes.

**CONSULTE LOS APUNTES DE ELECTRICIDAD Y
MAGNETISMO, Cap. VII, ACERCA DE LOS DETALLES
DEL CALCULO QUE SE INCLUYE A CONTINUACION**

Como la componente del campo eléctrico $\vec{E}(\vec{x}, t)$, *tangencial* a la superficie del *conductor perfecto* debe ser *nula*,

$$\vec{E}_{tangencial} |_{\text{superficie del cubo}} = 0.$$

Esta es la condición de borde que debemos aplicar en la superficie $x = 0$ y, en general, en cada una de las superficies del cubo.

La energía promedio $\langle \epsilon \rangle$ asociada al oscilador armónico utilizando la distribución de Maxwell como factor de peso es:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \epsilon \exp(-\beta \epsilon) d\epsilon}{\int_0^{\infty} \exp(-\beta \epsilon) d\epsilon} = \frac{1}{\beta} = kT.$$

El oscilador constituye el modelo de un conductor perfecto que estamos utilizando en este caso.

Para calcular la energía promedio del campo electromagnético encerrado en la cavidad, le asociaremos una energía ϵ a cada uno de los *modos de vibración* correspondientes a cada frecuencia ν de oscilación del campo eléctrico. Este número que designaremos por N_ν se denomina *la degeneración* de la frecuencia ν .

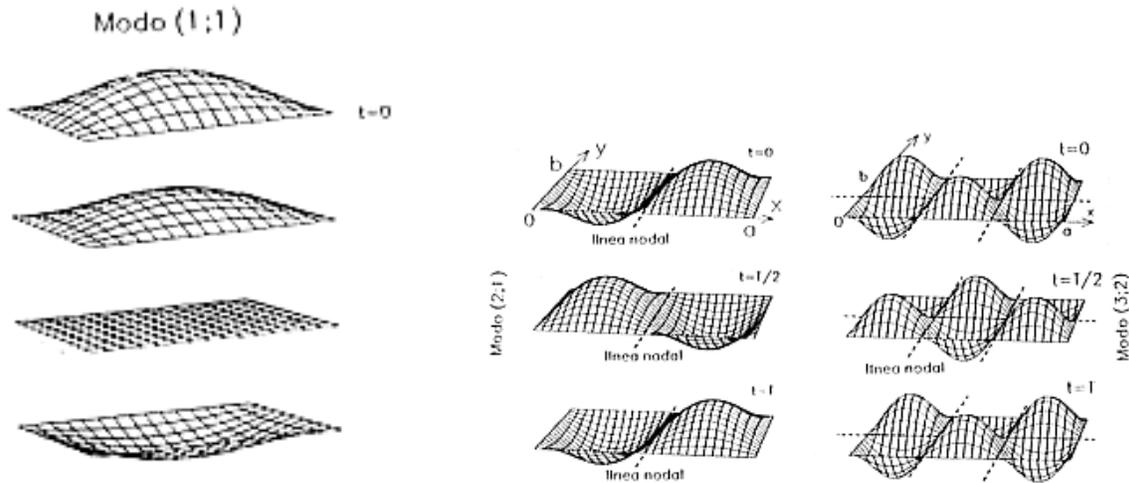


Figura VII.4: Las oscilaciones de la membrana de una tambor constituyen una versión simplificada (en dos dimensiones) de los modos de oscilación asociados a una frecuencia en particular. Los distintos modos se denominan la degeneración asociada a la frecuencia ν .

Como se desprende de las ecuaciones de Maxwell, la ecuación que debe satisfacer el campo eléctrico sin fuentes, en el interior de la caja es la siguiente:

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0.$$

Esta ecuación se deduce directamente de las ecuaciones de Maxwell. En realidad ésta ecuación son en realidad tres ecuaciones diferentes. Las soluciones de estas ecuaciones que satisfacen las condiciones de borde son:

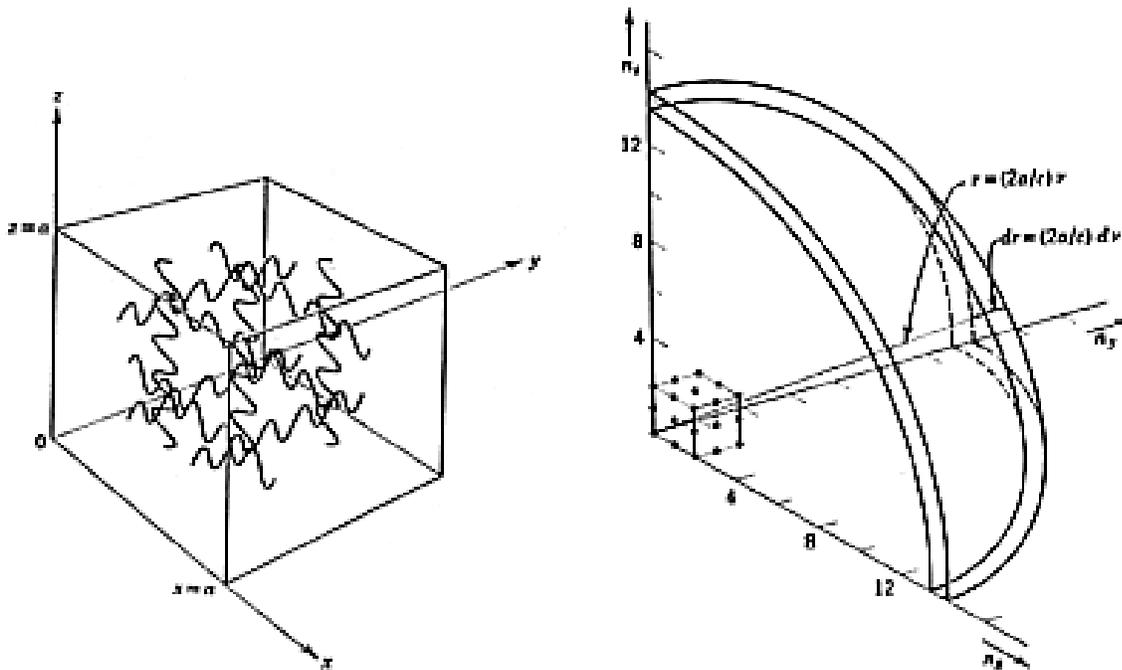
$$E_x = E_{ox} \cos\left(n_1 \frac{\pi x}{L}\right) \text{sen}\left(n_2 \frac{\pi y}{L}\right) \text{sen}\left(n_3 \frac{\pi z}{L}\right) \text{sen} 2\pi \nu t$$

$$E_y = E_{oy} \text{sen}\left(n_1 \frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(n_2 \frac{\pi y}{L}\right) \text{sen}\left(n_3 \frac{\pi z}{L}\right) \text{sen} 2\pi \nu t$$

$$E_z = E_{oz} \text{sen}\left(n_1 \frac{\pi x}{L}\right) \text{sen}\left(n_2 \frac{\pi y}{L}\right) \cos\left(n_3 \frac{\pi z}{L}\right) \text{sen} 2\pi \nu t$$

Estas ecuaciones satisfacen las condiciones de borde impuestas, vale decir:

$$\vec{E}_{tang} = 0, \quad (\text{en cada pared del conductor perfecto})$$



Por ejemplo:

$$E_x = 0, \quad \text{para } \left\{ \begin{array}{l} y = 0 \\ y = L \end{array} \right\} \text{ y también para } \left\{ \begin{array}{l} z = 0 \\ z = L \end{array} \right\}.$$

Para que esta ecuación efectivamente se cumpla, los valores de n_x , n_y y n_z no pueden ser arbitrarios. Al introducirlos en la ecuación de onda escrita anteriormente, se observa que estos valores no pueden ser arbitrarios: los valores expuestos deben satisfacer la siguiente ecuación:

$$-\left[\left(\frac{n_1\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n_2\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n_3\pi}{L} \right)^2 \right] E_x = -\frac{1}{c^2} (2\pi\nu)^2 E_x,$$

despejando ν de esta ecuación, obtenemos:

$$\left. \begin{array}{l} \nu = \frac{c}{2L} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2} \\ (n_1, n_2, n_3) \end{array} \right\} n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \left(\frac{2L}{c} \nu \right)^2.$$

Definiendo $N_\nu d\nu$ como el número de modos de oscilación cuya frecuencia se ubica en el rango entre ν y $(\nu + \Delta\nu)$ y considerando los enteros n_1 , n_2 y n_3 como una variable continua, entonces el número de modos está dado por el volumen comprendido en el interior del cascarón esférico

contenido en el octante donde todos los n son positivos:

$$\# \text{ de modos} = dN = \frac{dN}{d\nu} \nu = N_\nu d\nu = \frac{1}{8} 4\pi n^2 dn = 4\pi \frac{4L^2 \nu^2}{c^2} \frac{d\nu}{\nu},$$

$$\text{Como } n = \frac{2L\nu}{c}, \Rightarrow N_\nu d\nu = 4\pi \frac{L^3 \nu^2}{c^3} d\nu,$$

incluyendo un factor 2 en frente de las ecuaciones, proveniente de las dos polarizaciones que puede adoptar una onda electromagnética, y definiendo V como el volumen de la cavidad, tenemos:

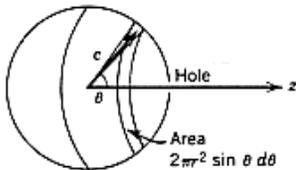
$$N_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} V, \quad \langle \varepsilon \rangle = k_B T \quad k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/}^\circ\text{K}.$$

Utilizando el principio de equipartición, es decir, multiplicando cada modo posible (o grado de libertad, si se quiere) por la energía de equilibrio termodinámico, tenemos:

$$u_\nu(T) d\nu \equiv \frac{\text{Energía}}{\text{u. de volumen}} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot kT d\nu$$

donde u_ν es la densidad de energía entre la frecuencia ν y $\nu + d\nu$.

Averaging over rays with velocity components to the right.



$$\langle \varepsilon_z \rangle = \frac{\int_0^{\pi/2} (c \cos \theta) 2\pi r^2 \sin \theta d\theta}{\int_0^{\pi/2} 2\pi r^2 \sin \theta d\theta} = \frac{c \int_0^1 x dx}{\int_0^1 dx} = \frac{c}{2},$$

$$I_\nu = \frac{1}{2} \langle \varepsilon_z \rangle u = \frac{c}{4} u.$$

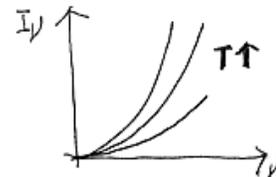


Figura VII.5: Para calcular la intensidad de la frecuencia emitida a través de la apertura debemos multiplicar la densidad de energía $u_\nu d\nu$, por el factor $[c/4]$, cuyo origen se explica en la Figura. También se ilustra el resultado clásico de la radiación, llamado catástrofe ultravioleta.

Veamos ahora la expresión de la la intensidad emitida I_ν :

$$\frac{c}{4} \cdot u_\nu = I_\nu(T) d\nu = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} kT d\nu.$$

Aquí podemos observar que a medida que aumenta ν el número de estados o modos degenerados de oscilación aumenta con el cuadrado de ν . De esta forma a medida que ν aumenta se

necesita más energía del recipiente térmico para darle a cada uno de los modos de vibración la energía promedio ϵ , que le corresponde de acuerdo al principio de equipartición de la energía.

Este resultado *no* es correcto: se necesita una cantidad infinita de energía para alimentar a los modos de frecuencias más altas, puesto a cada uno de ellos –de acuerdo con el principio de equipartición–, le corresponde una energía kT y su número aumenta sin cota. Esto se denomina la *catástrofe del ultravioleta*, debido a que ocurre para las frecuencias altas o longitudes cortas, más allá del color azul que es nuestro extremo visible.

Diversas críticas a este modelo clásico fueron surgiendo como una posible justificación de este resultado. La imposibilidad de encontrar una explicación a este espectro universal motivó el modelo de Max Planck que describimos a continuación.

VII.4. Max Planck y los cuantos de energía

Para comenzar con esta sección repasaremos brevemente los ingredientes que usaremos de la física estadística.

VII.4.1. La distribución de Maxwell-Boltzmann

Hipótesis básicas:

→ Muchas partículas: N con $N \rightarrow \infty$

→ Equilibrio Termodinámico \equiv Mínimo de Fluctuaciones.

→ Cada partícula se ubica en alguno de los niveles de energía disponibles: ϵ_i .

$$\begin{array}{l} \epsilon_r \text{ ---} \\ \vdots \text{ ---} \\ \vdots \text{ ---} \\ \epsilon_3 \text{ ---} \\ \epsilon_2 \text{ ---} \\ \epsilon_1 \text{ ---} \end{array}$$

Definimos W como el número de formas posibles de ordenar las N partículas en los r niveles posibles de energía, para obtener la configuración (n_1, n_2, \dots, n_r) :

$$W \equiv \frac{N!}{n_1! \cdot \dots \cdot n_r!}$$

Por sus propiedades, por ejemplo la adición: $\ln W_1 \cdot W_2 = \ln W_1 + \ln W_2$, nos interesa el

logaritmo natural de W :

$$\ln (W_n(n_1, n_2, \dots, n_r)) = \ln \left[\frac{N!}{n_1! \dots n_r!} \right]$$

El equilibrio de este sistema se ubica en el mínimo de esta expresión sujeto a las siguientes condiciones:

$$N = n_1 + n_2 + \dots + n_r, \quad \text{con } N = \text{número de partículas,}$$

$$E = n_1 \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_r n_r, \quad \text{con } E = \text{energía total del sistema.}$$

El resultado es: $n_i = \frac{N}{Z} e^{-\beta \varepsilon_i}$ y la probabilidad se define como: $P_i \equiv \frac{n_i}{N} = \frac{e^{-\beta \varepsilon_i}}{Z}$

Donde Z se denomina la *función de partición*, y $Z = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}$. Por otra parte $\beta = 1/(kT)$.

VII.4.2. La hipótesis de Max Planck

Con el objeto de encontrar una expresión que coincidiera con las curvas de emisión de un cuerpo negro desplegadas por los físicos experimentales, Planck estudió diversas aproximaciones en forma analítica. No buscaba una explicación conceptual sino –como lo expresamos–, una fórmula que funcionara. Planck se percató que la energía promedio (kT) utilizada en la solución propuesta por Rayleigh y Jeans, debía ser modificada para contener alguna función de la frecuencia ν , precisamente para eliminar la dependencia ν^2 que se obtenía finalmente y que significaba la catástrofe ultravioleta.

La propuesta de Planck afirmaba que si el campo electromagnético oscila con una frecuencia ν los niveles de energía accesibles –los valores de ε_i –, eran proporcionales a dicha frecuencia ν :

$$\varepsilon_n = n h \nu = n \hbar \omega, \quad \text{con } \hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (\text{VII.1})$$

En el cálculo clásico asociábamos la energía promedio kT a cada uno de los modos posibles de oscilación asociados a la frecuencia ν . El valor kT proviene de un promedio de todas las energías posibles suponiendo que se reparten en un continuo. En esta última ecuación las energías tienen un conjunto infinito de estados posibles de acceder, pero es un infinito numerable; el promedio debe obtenerse a partir de una *sumatoria* en lugar de una integral. El resultado es diferente como veremos a continuación.

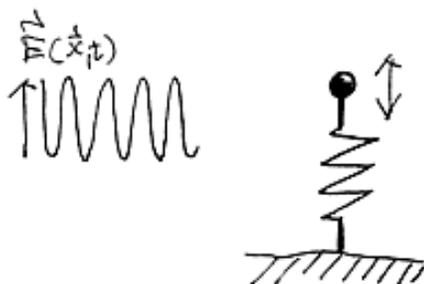
El cambiar la integral por una sumatoria no es un cambio formal. Estamos postulando que cualquier oscilador armónico simple puede tener sólo un espectro de energías de la forma $(n h \nu) \equiv E_n$, donde ν es la frecuencia y h una constante.

Esta idea *no* pertenece a la física clásica y constituyó toda una revolución. Para tener una idea de lo magnitud del cambio conceptual que introducía basta mencionar que Max Planck introdujo la expresión $E_n = n h \nu$ en 1901 y sólo diez años después, en 1910, envió el siguiente trabajo acerca de la radiación de cuerpo negro. Durante esos años trabajó sin interrupción en la idea de los *cuanta* de energía tratando de mostrar que sólo eran una hipótesis de trabajo y carecían de realidad física. Con el tiempo se convenció de lo acertado de su postulado.

Entre las consecuencias que podemos mencionar está el hecho que si el campo electromagnético posee estos niveles de energía y está en equilibrio térmico con los osciladores que modelan el comportamiento de la pared de la cavidad, éstos también deben adoptar los mismos niveles de energía para poder interactuar con el campo. La hipótesis de Planck no se detiene en el campo electromagnético, se difunde al resto de los modelos empleados en física para representar el comportamiento de la naturaleza.

No todos los físicos de aquel tiempo pensaban igual. James Jeans (físico muy influyente en esa época y que resolvió innumerables problemas de mecánica clásica, electricidad y magnetismo, gravitación ... ver, por ejemplo el libro de Electricidad y Magnetismo en la biblioteca de Física) sostenía que el principio de **equipartición de la energía** no podía ser aplicado aquí, Jeans proponía que en realidad no existía equilibrio termodinámico entre la radiación y las paredes del recipiente.

Por otro lado existían otros revolucionarios (Einstein entre ellos!) que opinaban que la falla del principio de equipartición de la energía era una clara indicación que a pesar de todos los éxitos de la física del siglo XIX, ésta debía sufrir *cambios drásticos*.



Max Planck se situaba entre estos dos extremos. Planck llegó a su hipótesis de que la energía sólo se adquiría en unidades de $h \nu$ buscando una fórmula que reprodujera el espectro observado. Por esta razón no podía tener alguna seguridad que su hipótesis era –conceptualmente–, la correcta. De hecho con el tiempo Planck se fue distanciando de los revolucionarios cuánticos. Einstein, por ejemplo, sostenía que los *cuanta* de luz introducidos por Planck eran una consecuencia necesaria e inevitable. Añadía que la imposibilidad de explicar el espectro de un cuerpo negro constituía una señal de una crisis de la física clásica que sólo podía ser resuelta

realizando cambios conceptuales profundos, como los que había iniciado Planck. Esta opinión contraponía la intuición de Einstein frente a la de algunos de sus colegas más destacados.

Después de obtener la expresión de la radiación de un cuerpo negro a partir de este postulado, volveremos a describir nuevos experimentos que confirman la universalidad del postulado de Planck. Mostraremos que adoptando esta forma de pensar, fenómenos que antes parecían un puzzle, se pueden explicar a través de estos principios.

Cálculo de la energía promedio utilizando sumatorias

Recordemos primero el cálculo clásico:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}{\int_0^{\infty} e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}, \quad \text{definiendo } x = \varepsilon,$$

$$\frac{d}{d\beta} \underbrace{\ln \left(\int_0^{\infty} e^{-\beta x} dx \right)}_{\ln \left[+\frac{1}{\beta} \right]} = \frac{-\int_0^{\infty} x e^{-\beta x} dx}{\int_0^{\infty} e^{-\beta x} dx} \quad \text{entonces}$$

$$\langle \varepsilon \rangle = -\frac{d}{d\beta} (-\ln \beta) = \frac{1}{\beta}, \quad \text{con } \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\langle \varepsilon \rangle = k_B T$$

A continuación calculamos el mismo promedio utilizando la proposición de Planck: $\varepsilon_n = n h \nu$.

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_n^{\infty} \varepsilon_n e^{-\beta\varepsilon_n}}{\sum_n^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_n}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n h \nu e^{-n h \nu \beta}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n h \nu \beta}}$$

Si definimos

$$x \equiv \frac{h \nu}{k_B T} = \beta h \nu, \quad \text{entonces } \langle \varepsilon \rangle = \frac{x}{\beta} \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n e^{-n x}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n x}},$$

Usando el mismo procedimiento que en el cálculo anterior, obtenemos:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\left(\sum_{n=1}^{\infty} n e^{-n x} \right)}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n x}} = -\frac{d}{dx} \left\{ \ln \left(\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n x} \right) \right\},$$

evaluando la derivada que aparece en el segundo término:

$$-\frac{d}{dx} \ln [(1 - e^{-x})^{-1}] = \frac{d}{dx} \ln [(1 - e^{-x})] = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}},$$

de este modo, la energía promedio es:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{x \sum n e^{-nx}}{\beta \sum e^{-nx}} = \frac{x}{\beta} \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{h\nu}{e^{(h\nu)/kT} - 1}.$$

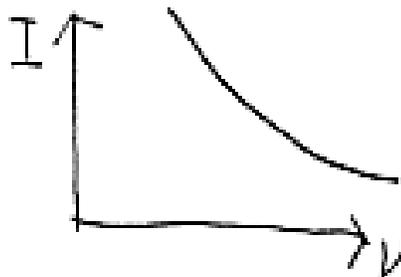
La energía promedio es entonces:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Tal como lo comprobó Planck, la energía promedio depende de la frecuencia y de esta manera es posible cancelar el desborde de la función cuando las energías son muy altas. Cuando las energías son bajas se recupera la expresión de Rayleigh–Jeans: si $h\nu \gg kT$,

$$\langle \varepsilon \rangle \approx \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \simeq h\nu e^{-h\nu/kT},$$

Así que la constante de Planck h , no desaparece en esta aproximación, pero la energía promedio disminuye *exponencialmente* a medida que aumenta la energía.



Por otra parte, si $h\nu \ll kT$, entonces:

$$\langle \varepsilon \rangle \approx \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \simeq \frac{h\nu}{\beta h\nu} \simeq kT,$$

justamente el valor clásico obtenido en la aproximación de Rayleigh–Jeans. Queda claro entonces que dicha aproximación es válida sólo para bajas energías $h\nu \ll kT$, y que las suposiciones hechas en esa ocasión no pueden ser desechadas con motivo de este experimento.

Con este cálculo se muestra que *cualquiera sea la temperatura*, existe un rango de longitudes de onda situadas a la izquierda de λ_{\max} , para las cuales la aproximación clásica ($\bar{E} \simeq kT$) no es válida, los efectos cuánticos en la distribución de la energía son observables para este rango de energías. El punto de vista usado por Rayleigh-Jeans es válido sólo en la región ubicada a la derecha del valor λ_{\max} .

Note que altas frecuencias corresponden a longitudes de onda corta.

El punto de vista de Einstein, afirmando que el éxito del postulado de Planck, no era un hecho fortuito sino que reflejaba un principio fundamental adoptado por la naturaleza, se ve respaldado por este resultado. Sin embargo la ratificación de este postulado al ser confirmado por el éxito obtenido en otros experimentos fue el que finalmente generó su aceptación por el resto de la comunidad de físicos.

Con esta aproximación la energía por unidad de volumen en el interior de un cuerpo negro para frecuencias entre ν y $(\nu + d\nu)$ es :

$$u_T(\nu) d\nu = \underbrace{8\pi \frac{\nu^2}{c^3} d\nu}_{\text{\# de estados por unidad de volumen}} \times \underbrace{\frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1}}_{\text{energía promedio por intervalo de frecuencia}}$$

A continuación recuperaremos algunos resultados indicados anteriormente que fueron obtenidos mediante la termodinámica clásica y en base a los resultados experimentales. Con la formulación de Planck, todas las constantes relevantes serán evaluadas en función de constantes universales. Este es, sin duda, otro acierto de la teoría.

La fórmula de Wien

En 1893, Wien obtuvo la siguiente formula basada en datos empíricos:

$$I_T = \frac{f(\lambda T)}{\lambda^5}. \text{ Utilizando los resultados de Planck, se obtiene:}$$

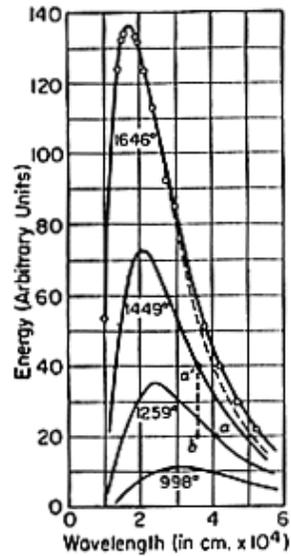
$$u_T(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^3 h d\nu}{c^3(e^{\beta h\nu} - 1)}, \text{ reemplazando } \nu = \frac{c}{\lambda} \text{ se obtiene :}$$

$$u_T(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \times \frac{d\lambda}{e^{\beta h\nu} - 1}.$$

A partir de la última expresión, podemos identificar la función $f(\lambda T)$, como:

$$f(\lambda T) = \frac{8\pi hc}{e^{\left(\frac{hc}{\lambda T}\right)} - 1}$$

Esta función corresponde entonces al comportamiento de la densidad de energía observado al interior de un cuerpo negro.



Ley de Stefan–Boltzmann

$$\begin{aligned}
 I_{\nu}(T) &= \frac{c}{4} \cdot u_{\nu}(T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \times \langle \varepsilon \rangle \\
 &= \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\frac{h\nu}{e^{kT}} - 1} = \frac{2\pi h}{c^2} \times \frac{(kT)^3}{h^3} \times \frac{x^3}{e^x - 1}
 \end{aligned}$$

Definiendo: $x \equiv \frac{h\nu}{kT} \Rightarrow \nu = \left(\frac{kT}{h}\right) x$, De aquí obtenemos:

$$I_{\nu}(T) = \frac{2\pi k^3}{c^2 h^2} \cdot T^3 \cdot \frac{x^3}{e^x - 1}.$$

Integrando en todas las frecuencias, tenemos:

$$I(T) = \int_0^{\infty} d\nu I_{\nu}(T) = \frac{2\pi k^3}{c^2 h^2} \cdot T^3 \cdot \left(\frac{kT}{h}\right) \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$$I(T) = \left(\frac{2\pi k^4}{c^2 h^3}\right) \cdot T^4 \cdot \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

pero $\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$, de modo que

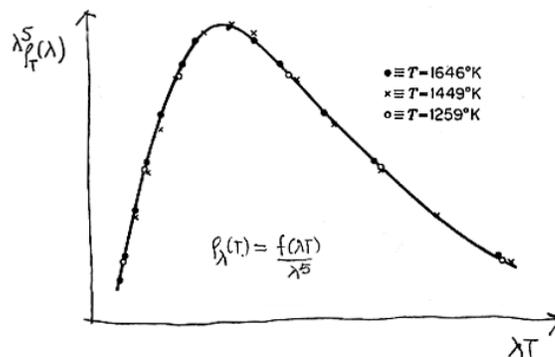
$$I(T) = \sigma T^4, \quad \text{con } \sigma \equiv \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^2} = 5,676 \times 10^{-8} \frac{\text{Watts}}{\text{m}^2} \times (\text{°K})^4$$

Análogamente, podemos escribir esta misma función con dependencia en la longitud de onda:

$$\begin{aligned} I_{\lambda}(T) d\lambda &= \frac{c}{4} \cdot u_{\nu}(T) d\nu \\ &= \frac{c}{\lambda^2} \cdot \frac{c}{4} \cdot \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \\ &= \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \end{aligned}$$

$$I_{\lambda}(T) = \frac{2\pi(k_B T)^5}{h^4 c^3} \cdot g(x)$$

$$g(x) = \frac{x^5}{e^x - 1}, \quad \text{una función universal.}$$



Calculemos el valor de alguna de estas expresiones. Si $T = 300^\circ \text{K}$ y $k = 1,38 \times 10^{-16} \text{ erg } ^\circ \text{K}^{-1}$, entonces:

$$\frac{kT}{h} = \frac{4,2 \times 10^{-14}}{6,62 \times 10^{-27}} \simeq 7 \times 10^{12} (\text{seg})^{-1}.$$

Si ponemos $\nu \simeq 7 \times 10^{12} (\text{seg}^{-1})$, que corresponde a una longitud de onda $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^{10}}{7 \times 10^{12}} = 4 \times 10^{-2} = 4 \times 10^{-3} \text{ cm}$, tenemos que $kT = h\nu$. Es decir a una temperatura de 300°K , corresponde la energía de una onda asociada al *infrarrojo*.

Recordemos los valores de la longitud de onda asociados a los colores visibles:

$$\lambda_{\text{azul}} \sim 400 \text{ nm}, \quad \lambda_{\text{verde}} \sim 530 \text{ nm}, \quad \lambda_{\text{rojo}} \sim 700 \text{ nm}, \quad 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}.$$

Como el valor de λ obtenido es menor que el correspondiente al color rojo: $\Rightarrow \lambda = 4 \times 10^{-3} \text{ cm} \rightarrow$ *infrarrojo*.

Utilicemos la expresión obtenida por Wien para asociar una temperatura con la longitud de onda en la cual radía con mayor intensidad:

$$\lambda_{\text{max}} \cdot T = 0,2898 [\text{cm}] \times [^\circ \text{K}]. \quad \lambda_{\text{max}} \simeq \frac{,3}{300^\circ \text{K}} = 10^{-3} \text{ cm}.$$

VII.4.3. La constante de Planck y las nuevas unidades fundamentales

La solución encontrada por M. Planck postuló que la onda electromagnética sólo puede adquirir energías discretas. Al establecer el equilibrio termodinámico con los osciladores armónicos en las paredes de la cavidad, éstos también deben funcionar de acuerdo al mismo principio.

Los valores de la energía E_n , a los que una onda electromagnética (o un oscilador) de frecuencia ν pueden acceder están determinados por:

$$E_n = n h \nu, \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \text{ y } h \equiv \text{constante de Planck} = 6,6 \times 10^{-34} \text{ joule}\cdot\text{s}.$$

$$\text{Las dimensiones de } h \text{ son: } [h] \equiv F \cdot L \cdot T = M \frac{L}{T^2} \cdot L \cdot T = M \frac{L^2}{T},$$

Note que estas son las unidades correspondientes al momento angular: $M \times \frac{L}{T} \times L = [\vec{P} \wedge \vec{r}] \equiv$ momento angular. Es decir, si h es una constante universal entonces existe una unidad natural para expresarla. Esto es equivalente a lo que sucede con la carga eléctrica e : cualquier carga finita está compuesta de un gran número de cargas fundamentales $Q = N e$. En este caso ocurre

que sólo algunas de las partículas elementales tienen momento angular intrínseco –conocido como el *spin*–, en múltiplos enteros de \hbar .

Podemos relacionar esta nueva unidad con el resto de las constantes fundamentales que ya conocemos en física, como por ejemplo la constante de gravitación universal G . Escribamos esta constante en función de las unidades fundamentales: largo, masa y tiempo.

$$[G] = \frac{F}{M^2} L^2 = \frac{ML}{T^2} \cdot \frac{L^2}{M^2} = \frac{L^3}{T^2} \cdot \frac{1}{M}.$$

Combinándola con la velocidad de la luz y la constante h , tenemos:

$$\frac{G}{ch} = \frac{L^2}{T} \cdot \frac{1}{M} \cdot \frac{1}{\frac{ML^2}{T}} = \frac{1}{M^2}$$

De aquí obtenemos una nueva unidad fundamental de masa, la *masa de Planck*:

$$M_{\text{Planck}} = \left(\frac{c\hbar}{G} \right)^{1/2} = 10^{-5} gr.$$

Construyamos a continuación una unidad fundamental de longitud, el *largo de Planck*:

$$[G] \cdot [\hbar] = \frac{ML^2}{T} \cdot \frac{L^3}{T^2} \cdot \frac{1}{M} = \frac{L^5}{T^3} = \left(\frac{L^3}{T^3} \right) \cdot L^2$$

$$\left[\frac{G\hbar}{c^3} \right]^{1/2} = \text{Largo de Planck.}$$

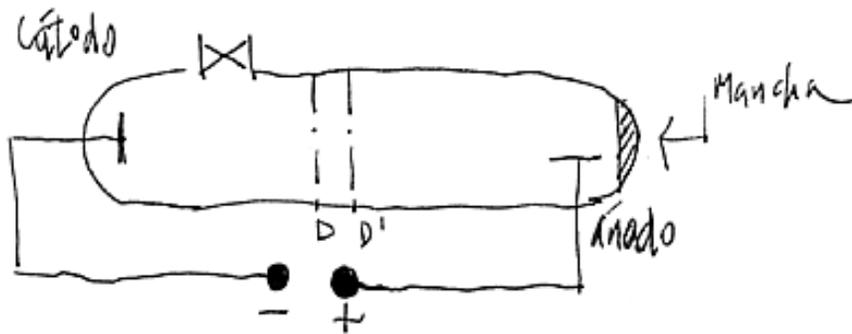
$$G = 6,67 \times 10^{-8} \text{ CGS}, \quad G = 6,67 \times 10^{-11} \text{ MKS.}$$

Un nuevo número adimensional puede obtenerse a partir de la carga eléctrica e , se denomina la *constante de estructura fina* y caracteriza las interacciones electromagnéticas:

$$\left[\frac{e^2}{\hbar c} \right] \equiv \frac{1}{137} \quad [CGS], \quad \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right] \quad [MKS], \quad 1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ Joule.}$$

VII.4.4. El descubrimiento del electrón

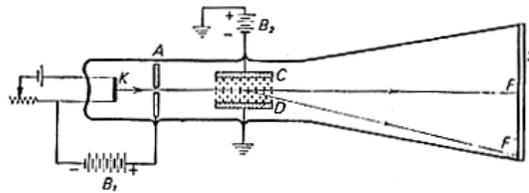
Los casos siguientes consolidan la hipótesis de Planck. La historia reciente comienza con el descubrimiento del e^- por J.J. Thompson usando un tubo de rayos catódicos.



Un tubo casi sin gas $p = 10^{-2}$ mm. de Hg en el cual se aplica una diferencia de voltaje alto (≈ 500 Volts) produce una mancha luminosa en el extremo del tubo. Si se coloca un objeto entre el cátodo y el extremo del tubo este proyecta una sombra en el extremo opuesto, revelando que los elementos que producen la sombra viajan en línea recta.

Usando el aparato que se indica en la figura donde se insertó un condensador de placas paralelas, Thomson logró deflectar estas partículas y encontrar la razón e/m

$$\frac{e}{m} = 1,76 \times 10^8 \frac{\text{Coulomb}}{g}$$



Esta razón carga-masa resultó ser 1836 veces mayor que la observada en átomos ionizados (experimento hecho en forma electrolítica) y Thomson supuso (correctamente, como se verá) que ambos tenían la misma "carga electrónica" pero distinta masa.

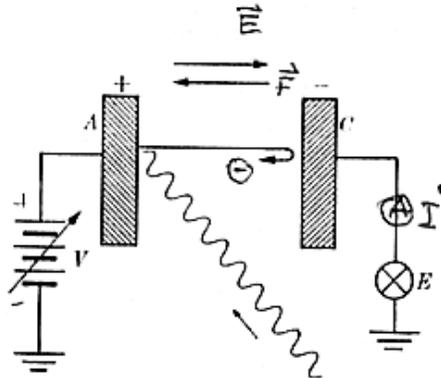
Millikan midió posteriormente la carga del electrón y de allí se pudo conocer la masa de éste.

$$e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ Coulomb} \quad m = 9 \times 10^{-27} \text{ gramos}$$

VII.5. Efecto fotoeléctrico

En 1887 Hertz descubrió que el efecto descubierto por Thompson se podía observar al incidir luz ultravioleta sobre una placa metálica al interior de un tubo al vacío.

La longitud de onda de la luz ultravioleta (U-V) es $\sim 10^{16} \text{ s}^{-1}$.



Al evacuar el tubo –de manera que los objetos que viajan del cátodo al ánodo y que generan una corriente no sean provenientes del gas que llena el tubo sino del cátodo mismo–, se pudo concluir que efectivamente las partículas que viajaban provenían del cátodo y eran liberados por la luz U-V. Lenard midió más tarde (1900) la razón (e/m) y concluyó que estos viajeros eran los mismos elementos que había descubierto J. J. Thompson y que los había denominado electrones.

Lenard determinó la relación existente entre la corriente producida por la luz U-V y el voltaje externo aplicado entre las placas y descubrió que incluso con un potencial negativo seguían fluyendo electrones. Este potencial negativo tenía un máximo que era *independiente de la intensidad de la luz incidente*. Intensidad es la energía por unidad de tiempo y de área. La intensidad de la luz U-V influía sólo en la corriente generada.

Este fenómeno *no* tenía explicación en el contexto de física clásica.

El potencial negativo máximo (V_{max}) sólo dependía de la naturaleza del cátodo, siendo en general del orden de $2 \rightarrow 5$ volts. Este efecto tampoco dependía de las trazas de gas residual que se hubiera dejado en el tubo.

Debemos tener en cuenta que la estructura de la materia a fines del siglo pasado y a comienzos de éste no era conocida. Recién se conocía la existencia del electrón, su masa y la masa del Hidrógeno ionizado.

La explicación clásica para este comportamiento era la siguiente: los electrones salen del material con cierta energía cinética. Los electrones que vienen del interior del metal pierden parte de su energía al chocar con otros en su camino y esto explica la disminución de la corriente cuando el potencial aplicado es muy pequeño.

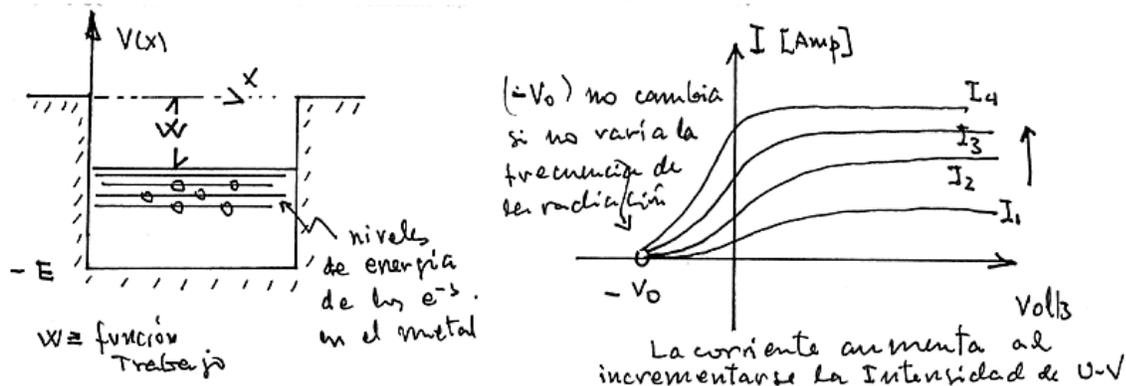


Figura VII.6: Modelo de un metal. Los electrones se mueven en un pozo de potencial que los mantiene cautivos y les impide escapar. Este es un potencial fenomenológico, es decir, da resultados que concuerdan con lo que se observa.

Los electrones que salen de la superficie *no* pierden energía en choques antes de dejar el metal y por lo tanto tienen una energía E_{max} .

Sin embargo había un inconveniente con este modelo: el tiempo que demoraba un electrón en adquirir la energía necesaria para salir del material era exageradamente largo. Más aún, no había explicación alguna para el hecho que al iluminar el cátodo con una luz de menor energía, una con mayor longitud de onda que un cierto valor crítico, no había flujo de electrones.

Ejemplo

De acuerdo a la teoría clásica, calcule el tiempo que demora un electrón en salir del metal.

Estimación del radio de un átomo.

Usemos por ejemplo Plata cuyo número atómico $A \simeq 100$. Como sabemos que un mol de plata –100 gramos de plata–, debe contener N átomos, donde $N = 6,022 \times 10^{23} \equiv$ Número de Avogadro, y que la densidad de la Ag es: $\rho_{Ag} \simeq 10 \text{ gr/cm}^3$, existen $6,02 \times 10^{23}$ átomos en 1 cm^3 de Ag y si suponemos –para estimar un orden de magnitud– que están apretados unos contra otros, entonces cada átomo debe ocupar un volumen:

$$\frac{1 \text{ cm}^3}{6,02 \times 10^{23}} \simeq 1,6 \times 10^{-24} \text{ cm}^3 \sim \frac{4\pi}{3} r^3 \quad (r \equiv \text{radio del átomo})$$

$$\Rightarrow r \approx \left(\frac{1}{80\pi} \times 10^{-24} \right)^{1/3} \sim 1,6 \times 10^{-8} \text{ cm}, \text{ de aquí obtenemos:}$$

$$r_{\text{Atomo Plata}} \sim 1,6 \times 10^{-8} \text{ cm} \sim 1 \text{ \AA}.$$

Estimación de la energía incidente sobre el átomo

Supongamos que la fuente de luz tiene una potencia de

$$100 \text{ watt} = 100 \frac{\text{joule}}{\text{seg.}} = 10^9 \frac{\text{erg}}{\text{s}} = 1,6 \times 10^{21} \frac{eV}{\text{s}}. \quad \boxed{e \equiv 1,6 \times 10^{-19} \text{Coulomb}}$$

Este es el número de fotones en lugar de emisión, si situamos la fuente a un metro de distancia, la intensidad disminuye proporcionalmente a $(1/r^2)$. Suponiendo que el fotocátodo se ubica a un metro de la fuente, éste recibe:

$$\frac{1,6 \times 10^{21}}{4\pi \times 10^4} \frac{eV}{\text{s} \cdot \text{cm}^2} \simeq 0,12 \times 10^{17} \frac{eV}{\text{s} \cdot \text{cm}^2}.$$

Si el átomo absorbe totalmente la energía incidente podemos calcular cuanto se demora en adquirir la energía que necesita para poder abandonar el átomo. Designemos dicha energía como E_o y supongamos que tiene un valor de $E_o \sim 5 eV$.

Para calcular el flujo de energía suponemos que el átomo absorbe toda la energía que lo atraviesa, de esta manera podemos estimar la energía que absorbe el átomo por unidad de tiempo:

$$0,12 \times 10^{17} \frac{eV}{\text{s} \cdot \text{cm}^2} \times \text{Área del átomo} = 0,12 \times 10^{17} \times \pi [1,6 \times 10^{-8}]^2 \approx 10,2 \frac{eV}{\text{s} \cdot \text{cm}^2}$$

En consecuencia, esta luz se demora $1/2$ segundo en arrancar un electrón del metal. Recordemos que en este modelo los electrones de conducción (los compartidos por todos los átomos del metal) viajan como partículas libres *dentro del conductor*. □

En 1928 Lawrence y Beams determinaron cuanto se demoraba un rayo U-V en arrancar un electrón de la superficie de un metal y encontraron que éste tiempo era 10^{-9} segundos. Esta diferencia entre el tiempo de emisión estimado y el valor experimental –prácticamente instantáneo– justifica las aproximaciones que hicimos en el ejemplo.

VII.5.1. El modelo de Einstein para el efecto fotoeléctrico

En 1905 Einstein escribió el trabajo: “On a heuristic point of view concerning the generation and transformation of light” (Heuristic \equiv algo útil para avanzar en un cierto esquema conceptual, pero que *no* está necesariamente en su forma final).

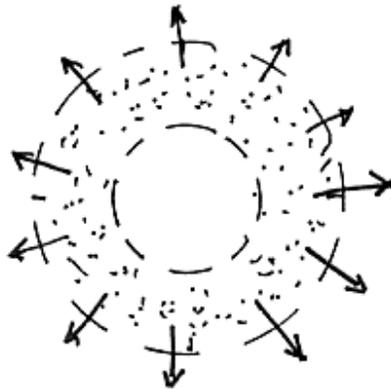
En este trabajo que le significó el Premio Nobel en 1922, Einstein propuso una nueva concepción de las ondas electromagnéticas. Insistió que las ecuaciones de Maxwell describían en forma insuperable los fenómenos ópticos como transmisión, reflexión, ... y en general los fenómenos de propagación que se llevaban a cabo en intervalos largos (comparados, por ejemplo, con la frecuencia de la luz). Uno no debía sorprenderse entonces que en fenómenos que ocurren en intervalos *cortos* de tiempo, por ejemplo la interacción entre luz y materia (como el efecto fotoeléctrico) su comportamiento fuera diferente.

Expresó que un frente de onda esférico puede ser considerado como una adición de puntos, cada uno con una energía fija que se propaga con la onda. La disminución de intensidad se debe a que en cada frente de onda la densidad de los puntos (paquetes de energía o fotones como los denominamos actualmente) disminuye al aumentar el área del frente.

Al provocar un destello en una pieza oscura –de acuerdo al punto de vista de Einstein–, se produce la emisión de un gran número de pequeños paquetes de energía (*fotones*) que se propagan en todas las direcciones. En el caso de un destello de luz monocromática – luz con sólo una longitud de onda presente–, cada uno de estos paquetes lleva la energía $h\nu$. Este es el postulado de Einstein: las ondas electromagnéticas están conformadas por paquetes de energía. Esta es la proposición de Planck llevada a sus últimas consecuencias.

Con este modelo pudo dar una explicación cabal del efecto fotoeléctrico: *postuló que cada electrón podía absorber uno de estos fotones como un todo ganando así en forma instantánea una energía $h\nu$.*

Es interesante notar que Einstein *no* dice como este traspaso ocurre, pero señala que éste es un esquema útil para describir este fenómeno. Este parece ser el origen de la palabra *heurístico* que aparece en el título de su trabajo. En resumen:



- La Luz monocromática es un conjunto de partículas, cada una con una energía $h\nu$
- Estos paquetes de energía se denominan fotones
- La intensidad de la luz monocromática es proporcional al número de fotones que la conforman. Cada uno de ellos tiene una energía $h\nu$.

¿Cómo se explica el efecto fotoeléctrico a la luz de estos nuevos postulados?

Sea E_{max} la energía máxima que puede ganar un electrón, con lo cual puede remontar el potencial adverso que se le impone. Sea W el pozo de potencial que contiene los electrones libres de un metal conductor. W , se denomina *la función trabajo*, y depende de la naturaleza del material. Los electrones, como se ilustra en la Figura, están en un potencial W , al llegar un fotón al metal *choca* (puesto que es una partícula) con el e^- , éste lo puede absorber haciéndolo desaparecer y ganando toda la energía $h\nu$ que tenía el fotón. Su energía final será

$$E_{final} = h\nu - W.$$

Si $E_{final} > 0$ el e^- puede escapar, en caso contrario este queda atrapado. El caso crítico es aquel en que $E_{final} = 0$, este es el último nivel de frecuencia que permite escapar del material y sólo los electrones de la superficie pueden hacerlo, puesto que el resto (al interior) chocan con la red cristalina y pierden parte de la energía y quedan atrapados.

Podemos hacer un experimento, variar la frecuencia ν de la luz incidente, y encontrar el valor de E_{max} para cada frecuencia. Si el esquema propuesto por Einstein es correcto, es decir, la ecuación que obedece la naturaleza es efectivamente

$$E_{max} = h\nu - W, \quad E_{max} = e\phi_o.$$

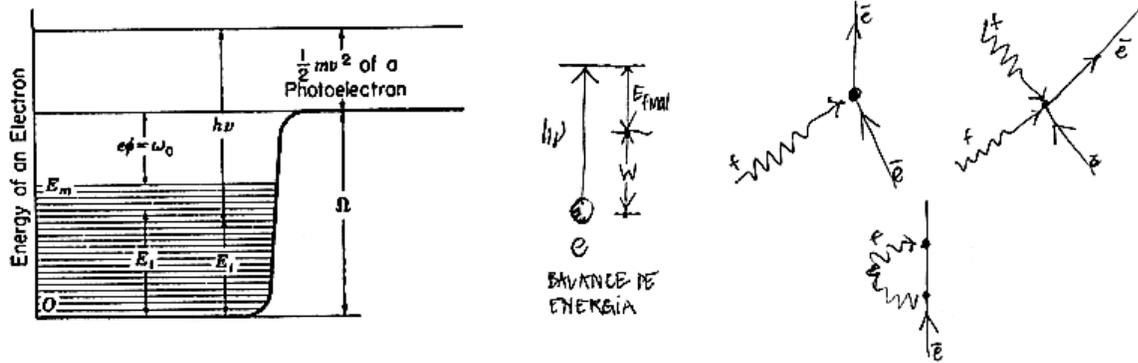
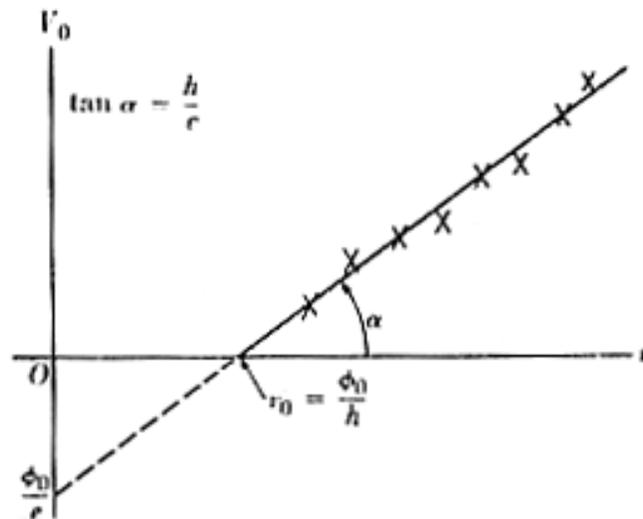


Figura VII.7: El fotón puede ser absorbido totalmente por el e^- , dispersado mediante un choque o simplemente no interactuar. No se explica el mecanismo de cómo el e^- absorbe al fotón.



entonces el gráfico debe ser una línea recta cuya pendiente es precisamente h !

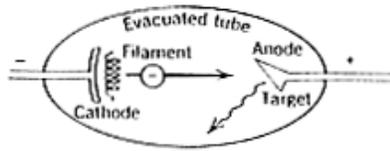
Este experimento fue realizado por Millikan en 1916 y el valor de h encontrado experimentalmente *correspondía* con un error menor que el .5%, con aquel encontrado por Planck en 1900, obtenido tratando de ajustar curvas experimentales correspondientes a las curvas de emisión en cuerpos negros.

Note que cuando utilizamos la palabra *luz*, nos referimos a cualquier onda electromagnética como: ondas de radio, de T.V., rayos x, rayos γ , luz ultravioleta ...

VII.6. Efecto Compton

Compton en 1923 descubrió que un haz de rayos- X de longitud de onda λ_o al incidir sobre un cristal se descomponía en haces de longitudes de onda λ_o y λ_1 con $\lambda_1 > \lambda_o$ para todo ángulo $\theta > 0$.

Antes de proseguir con esta descripción conviene mencionar que los rayos- X fueron descubiertos por Roentgen en 1895. En los 10 años siguientes se demostró (1906) que eran ondas electromagnéticas de alta energía.



De hecho en 1906 se demostró que eran ondas Transversales. Su longitud de onda es del orden de $10^{-8} \text{ cm} \sim 1 \text{ \AA}$.

En esta sección sólo nos referimos al fenómeno en el cual un rayo- X resulta desviado con longitud de onda λ_1 . El rayo- X que mantiene su longitud de onda incidente (λ_o) sufre una colisión elástica con la red cristalina y por ahora no lo analizaremos.

Usaremos el postulado de Einstein $E = h\nu$ y las ecuaciones de la relatividad especial.

Recordemos que $p^\mu p_\mu = m_o^2 c^2$, donde m_o es la masa en reposo de la partícula. Este número es nulo en el caso de un fotón

$$\frac{E^2}{c^2} - |\vec{P}|^2 = 0, \quad \left\{ p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{P} \right) \right\}, \quad \text{pero } E = h\nu \Rightarrow |\vec{p}| = \frac{h\nu}{c}.$$

Como un rayo- X tiene una energía que es 10^4 veces la de un fotón luminoso, el chocar con un e^- podemos considerar este último como en reposo. Podemos calcular la energía de un rayo x de $\lambda_x \simeq 10^{-8} \text{ cm}$.

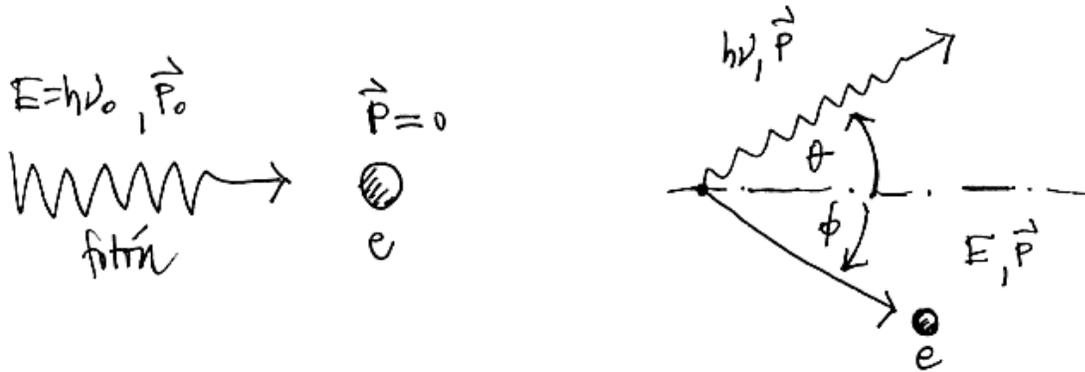
$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,6 \times 10^{-27}}{10^{-8}} \times 3 \times 10^{10} = 2 \times 10^{-9} \text{ ergs} = 2 \times 10^{-8} \text{ ergs}$$

Como $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ joule} = 1,6 \times 10^{12} \text{ ergs}$, podemos estimar la energía del rayo- X :

$$E_X = \frac{2,0}{1,6} \times \frac{10^{-8}}{10^{-12}} \sim 10^4 \text{ eV}. \quad \text{Recuerde que la masa de un } e^- \text{ es: } m_e = ,5 \times 10^6 \text{ eV}.$$

Energía de ionización del Hidrógeno en su estado fundamental es 13.6 eV. Por esto, en el choque de un rayo-X con un e^- de las capas más externas de un átomo se puede despreciar la energía cinética del e^- externo. Estos son los e^- 's que intervienen en este caso. Los e^- 's internos de átomos grandes con $A \gg 1$ están fuertemente ligados y producen otros fenómenos no considerados aquí.

El diagrama de este choque es el siguiente



Conservación de la energía:

$$\underbrace{h\nu_0 + m_0c^2}_{P_0 \text{ antes}} = h\nu_1 + \underbrace{\frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}}_{P_0 \text{ despues}}$$

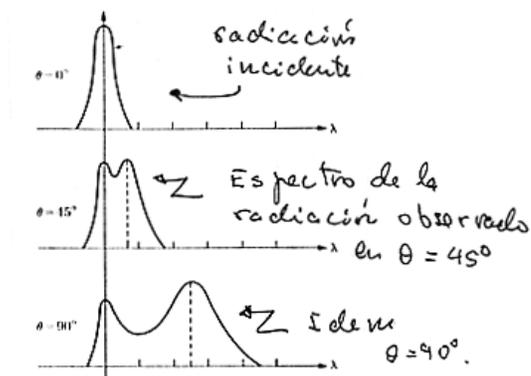
Conservación del momentum:

$$\text{eje } x : \frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu_1}{c} \cos\theta + \frac{m_0 v \cos\phi}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

$$\text{eje } y : 0 = \frac{h\nu_1}{c} \text{sen}\theta - \frac{m_0 v \text{sen}\phi}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

De estas ecuaciones se puede despejar en las ecuaciones el término:

$$\lambda_1 - \lambda_0 = \frac{2h}{m_0c} \text{sen}^2\theta/2 = \left(\frac{h}{m_0c}\right) (1 - \cos\theta)$$



Esta ecuación reproduce los resultados obtenidos experimentalmente por Compton. Podemos definir la constante que aparece al frente de la fórmula como *longitud de onda de Compton*:

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0 c},$$

a cada masa uno le asocia una longitud de onda usando las constantes universales h y c .

$$\lambda_C = \frac{6,62 \times 10^{-27}}{10^{-27} \cdot 3 \times 10^{10}} = 2,2 \times 10^{-10} \text{ cm} : \lambda \text{ de Compton asociada a un } e^-.$$

VII.7. Cronograma de la mecánica cuántica

1887 Hertz notó que la incidencia de luz U-V hacía que las chispas producidas por su tubo de vacío aumentaran levemente.

1911 C. T. R. Wilson, de origen británico, inventó, después de 12 años de trabajo, la cámara de niebla para la detección de partículas con carga.

1923 A. H. Compton realizó un experimento fundamental que sólo podía ser interpretado si se consideraba a los fotones como partículas chocando con los electrones.

Años más tarde Compton pudo rastrear la trayectoria de las partículas en la cámara de niebla de C. T. R. Wilson. Ambos recibieron el premio Nobel en 1928 por este experimento.

1895 W. K. Roentgen descubrió los rayos X estudiando el paso de descargas eléctricas en gases.

El primer premio Nobel (1901) le fue otorgado a W. K. Roentgen. En 1912, se demostró experimentalmente el carácter ondulatorio de los Rayos-X.

1896 M. A. Becquerel descubrió que el Uranio radiaba sin ser expuesto a la luz. Generó la duda si de esta forma se podía generar energía gratis. Posteriormente trabajó con Madame Curie y recibió el Premio Nobel (Becquerel y los Curie) en 1903 y los Curie en 1911.

Madame Curie descubrió en 1898 dos nuevos elementos Polonio y *Ra* este último el más poderoso (usado en las irradiaciones contra el cáncer)

1908 E. Rutherford (Nueva Zelanda) y su colaborador inglés F. Soddy ayudaron a entender el significado de la radioactividad. En 1903 formularon una teoría atómica de la radioactividad, de la desintegración y trasmutación de los átomos. En 1908 recibió el Premio Nobel de Química.

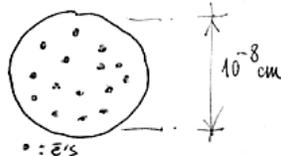
De acuerdo a Rutherford y Soddy existen 3 tipos de rayos α , β y γ . Los rayos α eran fragmentos de Radio que *no* eran Radio.

1906 Thomson descubrió el electrón y recibió el Premio Nobel en 1906. Su modelo del átomo era el de una sandía de carga positiva con los electrones, las semillas distribuidas uniformemente en él.

En 1911, Rutherford inventó su modelo del átomo que explicaba la desviación de la carga positiva está concentrada en el centro y tiene un tamaño diminuto (10^{-13} cm). Los electrones orbitan este núcleo (como en el sistema solar) a distancias enormes. Este modelo explica las violentas colisiones que experimentaba una partícula α al chocar con su núcleo.

Aquí aparece una contradicción con la teoría de Maxwell. Este átomo, de acuerdo a esta teoría, debía brillar y desaparecer. El electrón debería botar toda su energía en forma de radiación electromagnética.

Espectroscopistas, con su ritual de excitar los átomos de H , capturar su emisión y hacerla pasar a través de un prisma, sabían que brillaba pero su conjunto de líneas de emisión era discreto, no un continuo. ¹.



Johann Jakob Balmer, un profesor de escuela se encandiló con estos números y logró una fórmula empírica que explica alguno de estos números y los extendía a casos (infrarrojo y ultravioleta) que no conocían en ese tiempo. Todo comenzaba con un número mágico: $3,28787 \times 10^{15}$. Las frecuencias obtenidas podían obtenerse dividiendo este número por $1, 4, 9 \dots$, es decir por n^2 con $n = 1, 2, 3 \dots$

Los números observados se obtenían de acuerdo a las diferencias entre los distintos números generados con n .

En 1908 W. Ritz demostró que este mismo principio basado en la numerología se cumplía para muchos otros casos que no habían sido observados al momento de enunciar la teoría.

Balmer no recibió ningún reconocimiento en vida.

Este hecho experimental tampoco puede ser explicado por el modelo de Rutherford.

1922 Bohr obtuvo el premio Nobel de física. Bohr propuso modificación ad-hoc al modelo de Rutherford.

La idea era aplicar la misma restricción empleada en el oscilador armónico a su movimiento lineal al caso de un electrón dando vueltas a una circunferencia. Sólo ciertas órbitas son permitidas. El resto desaparece. En las órbitas permitidas no hay radiación electromagnética. *Se ignora* una de los resultados de las ecuaciones de Maxwell.

$$L = n\hbar, \quad L \equiv \text{momento angular.}$$

Sólo existe la posibilidad de saltar entre estos estados permitidos.

¹Espectro \equiv el conjunto característico de líneas brillantes que se observan al hacer pasar –a través de un prisma–, la emisión proveniente de un tubo que contiene trazas de un gas, sometido a una diferencia de potencial apreciable. El espectro de una serie de elementos aparece en la página en el capítulo de Líneas Espectrales en el siguiente sitio: <http://www.maloka.org/f2000/index.html>

Para conservar la energía, en cada salto se absorbe o emite un fotón. Aparece aquí la teoría de Einstein del protón. La teoría de Bohr (1913) arroja los números obtenidos por los espectroscopicos en forma con gran precisión. También obtiene el número mágico $3,28787 \times 10^{15}$ en función de números ya conocidos (e, m_e, \hbar)

1925 J. Franck y G. Hertz mostraron que la escalera de Balmer, contenida en la teoría de Bohr tenía existencia en la realidad. Recibieron el premio Nobel en 1925.

1913 H. G. J. Moseley, el más brillante de los físicos ingleses de la época fue muerto en la primera guerra mundial en un ataque a los Dardanelas.

Moseley, experimentando con rayos-X demostró que las regularidades encontradas en sus experimentos hacían plausible la idea que los átomos aumentaban regularmente su carga nuclear, dándole así más fuerza al modelo de Rutherford, y de paso al de Bohr.

1902 P. Zeeman y H. A. Lorentz compartieron el premio Nobel. Zeeman examinó la luz emitida por los átomos después de pasar por un poderoso imán. Encontró que las líneas se ensanchaban. Más tarde con un equipo mejor comprobó que se dividía en grupos de 2, 3 o más.

El modelo de Bohr, tenía sólo un número cuántico n , si añadimos otro, ℓ podía explicar los resultados de Zeeman.

1919 J. Stark (premio Nobel 1919) realizó el mismo experimento que Zeeman pero con un campo eléctrico obligado a sumar otro número cuántico a la teoría de Bohr.

Este acuerdo entre teoría y experimento realizado por Schwarzschild y Epstein en 1916 –en forma independiente–, fue impresionante.

La espectroscopía se convirtió en el área más pujante de la física atómica.

Al mejorar los instrumentos se descubrió que cada línea del espectro estaba formado por un subconjunto de líneas. ¿Cómo podía la teoría de Bohr explicar estos resultados?

En 1915 Sommerfeld encontró una solución al problema. La clave era la relatividad. La masa del electrón aumenta con la velocidad.

Usando relatividad en el modelo atómico de Bohr pudo explicar todas estas observaciones.

1925 G. Goudsmit y G. E. Uhlenbeck sugirieron que los electrones no sólo giraban en torno al núcleo sino también, al igual que los planetas, *giraban* en torno a sí mismos. Con esta corrección pudieron explicar la estructura hiperfina del átomo de H , sin recurrir a los efectos relativistas.

Quedaba así la duda: ¿Era la estructura fina una consecuencia del spin o de la relatividad?

El spin añadió un cierto número cinético al electrón. W. Pauli (Premio Nobel 1945) lo necesitaba urgente.

Su principio denominado de *exclusión* no podía ser introducido en la teoría de Bohr más que como una nueva regla especial. Con el cuarto número cuántico y el principio de exclusión llevó a evitar la sobrepoblación de electrones en cada nivel.

Con este argumento apareció una explicación coherente de la tabla periódica inventada por Mendeleev y refinada por Moseley.

El principio de exclusión no incluye fuerzas. Existen influencias de un nuevo tipo.

El principio de exclusión se aplica a toda una familia de partículas elementales denominadas *fermiones*.

VII.8. El átomo de Bohr

VII.8.1. Breve reseña de la historia del núcleo atómico

A principio de siglo se conocía el átomo y la existencia de partículas cargadas como el electrón. Sin embargo la organización de los electrones y el resto de las componentes del átomo era desconocida. A continuación se hace una reseña de como se estableció el modelo atómico.

El modelo de J. J. Thomson consistía en una esfera de un radio aproximadamente de 10^{-8} cm en la cual se hallaban los electrones uniformemente distribuidos. El resto de la esfera estaba compuesto de materia con carga positiva.

La evidencia que condujo a este modelo era la siguiente:

- el cátodo emite electrones,
- el átomo es neutro,
- la $m_e \ll m_{\text{átomo}}$.

El modelo actual del átomo fue introducido por Rutherford, como conclusión de sus experimentos realizados con partículas α .

Entre 1896 - 1898 Becquerel y Mme. Curie descubrieron 3 tipos de radiación en la materia, que fue denominada Rayos α, β y γ . Esta radiación era producida espontáneamente en elementos como *U* y *Ra*.

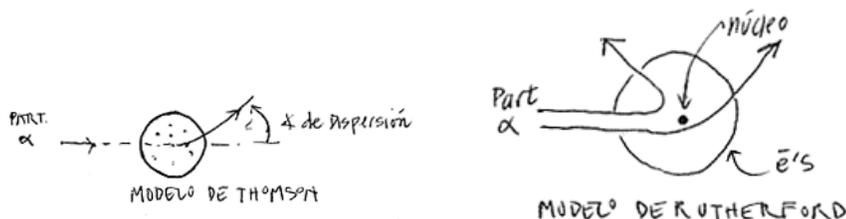
Rayos $\alpha \equiv$ núcleos doblemente ionizados de *He*, emitidos con gran velocidad pero detenidos fácilmente.

Los rayos β : son electrones muy energéticos.

Rayos γ : ondas electromagnéticas de gran energía.

El modelo de Thomson arrastraba la predicción que casi no habían partículas α dispersadas en

ángulos mayores que 90° , sin embargo el experimento de Rutherford –que consistía en bombardear un átomo con partículas α –, comprobó que dichas partículas eran dispersadas con una probabilidad distinta de cero en ángulos mayores que 90° .



Con su modelo, Rutherford pudo incluso estimar el tamaño del núcleo. Este resultó ser $\sim 10^{-13}$ cm \equiv 1 Fermi.

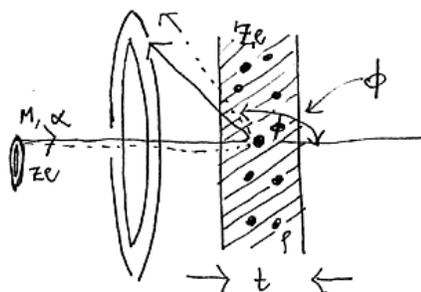
El modelo de Rutherford consistía en un carozo donde se concentraba la carga positiva (el *núcleo atómico*) y los electrones que se distribuían en capas a su alrededor ($r \sim 10^{-8}$ cm).

Lo interesante es que los cálculos fueron hechos usando mecánica clásica y como sabemos esto *es* un problema cuántico (dada la energía de las partículas). Sin embargo el factor h se cancela naturalmente cuando uno hace el cálculo cuántico, de forma que el resultado clásico (que ignora el número h) es correcto.

El resultado obtenido es:

$$N(\phi)d\phi = N_o \frac{\pi}{8} \rho t \left(\frac{z Z e^2}{\frac{1}{2} M v^2} \right)^2 \frac{\text{sen } \phi d\phi}{\text{sen}^4(\phi/2)}.$$

$N(\phi) d\phi \equiv$ número de partículas dispersadas entre el ángulo ϕ y $(\phi + d\phi)$



$t \equiv$ grosor del blanco

$\rho \equiv$ densidad del blanco

$ze \equiv$ carga de la partícula α

$M \equiv$ masa de la partícula α .

$Ze \equiv$ carga del núcleo.

VII.8.2. Modelo atómico de Bohr

El modelo de Rutherford explicaba correctamente la dispersión de partículas α bombardeando un núcleo atómico. Sin embargo había mucho más información disponible que requería una explicación. Estas eran las líneas espectrales. Al introducir un gas en un tubo, donde se envía una chispa entre los electrodos esta luz lleva las huellas digitales del gas.

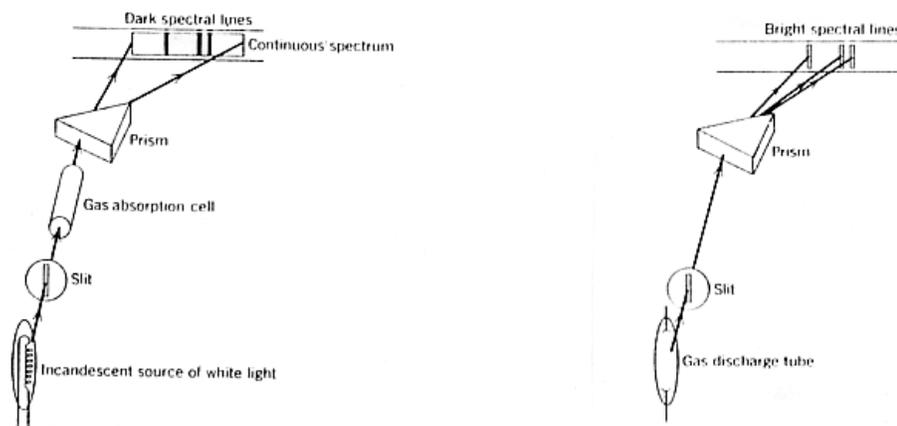


Figura VII.8: La emisión de un tubo que contiene gas posee longitudes de onda que lo caracterizan. El Hg emite desde el verde al azul llegando al ultravioleta. El Ne emite principalmente en el rojo. El Na se caracteriza por la emisión intensa en la vecindad del amarillo.

La espectroscopía de los componentes de un meteorito demostró que los materiales que lo componían eran idénticas a los elementos que se encontraban en nuestro planeta. Las líneas observadas se podían asociar con elementos conocidos. En algunos casos, como el He , se descubrió primero en el espectro de emisión del Sol. Finalmente hace, 30 años ocurrió un hecho sorprendente protagonizado por los astrónomos. Una serie de puntos que aparecían en una placa fotográfica y que parecían estrellas lejanas poseían un espectro que no calzaba con nada conocido

sobre la tierra. El enigma lo resolvió Marteen Schmidt en 1963 al comprobar que el espectro correspondía a la línea de emisión del H (la serie Balmer). Schmidt se dió cuenta que si multiplicaba cada una de las líneas de emisión por un factor 1,158 obtenía exactamente la serie Bamer. Los astrónomos habían observado fenómenos similares (pero en los que el factor de corrimiento era muy pequeño). Se concluyó que correspondían a un objeto que se alejaba rápidamente de nuestra galaxia, algo así como un 15 % de la velocidad de la luz. Si era un objeto extragaláctico debía emitir una cantidad asombrosa de energía desde su superficie.

Su distancia estimada era de 3×10^9 años-luz y la energía emitida en su superficie 2×10^{46} ergs/s. Este fue el nacimiento de los cuasares y también la fecha clave en que la Relatividad General comienza a intervenir directamente en los fenómenos astronómicos y a recobrar un lugar –que había perdido entre 1930 y 1965–, entre las distintas ramas de la física.

Con el tiempo la cantidad de espectros de distintos elementos aumentó notablemente junto con la exactitud de las mediciones. Franhoufer llegó a determinar hasta 700 líneas en el espectro de la luz solar (hoy se conocen más de 15.000!).

La empresa de explicar esta multitud de datos parecía una tarea formidable. Habían hechos que la complicaban aun más. La emisión de un gas a alta presión *no* presentaba un espectro discreto sino más bien uno *continuo*.

La primera pista provino de un profesor secundario que en 1885 publicó un trabajo *Acerca de las líneas espectrales del Hidrógeno*. En este trabajo apareció una expresión simple para la existencia de un grupo de líneas, las líneas Balmer que estaban caracterizadas por

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad R \equiv \text{constante de Rydberg} = 1,09678 \times 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

Más tarde se encontraron otras familias de líneas de emisión.

En 1924 aparecieron las líneas de Pfund. La expresión general de todas ellas es

$$\frac{1}{\gamma} = R \left[\frac{1}{(n')^2} - \frac{1}{(n'')^2} \right],$$

$$\begin{aligned} n' &= 1, & \text{serie de Lyman,} \\ n' &= 2, & \text{serie de Balmer,} \\ &\vdots \\ n' &= 5, & \text{serie de Pfund.} \end{aligned}$$

Esta descripción sólo sirvió para acomodar el átomo de Hidrógeno y algunas regiones de átomos más complicados. La constante de Rydberg se bautizó de este modo en honor de un espectroscopista sueco. Con esta expresión encontrada por Balmer *no* se encontró el nuevo camino de

solución para los problemas existentes, pero sí quedó de manifiesto que a pesar de la variedad de fenómenos observados, existía una organización, un plan, detrás de algunos de los datos conocidos.

Atomo de Bohr

En 1913 Bohr propuso un modelo del átomo que permitía reproducir el espectro observado del H y del He^+ (Helio ionizado). El modelo se basa en unos principios ad-hoc que toman elementos de mecánica clásica y de física cuántica.

Los postulados propuestos por Bohr son los siguientes:

1. Existe una atracción Coulombiana entre los electrones y el núcleo del átomo. El electrón se mueve en una órbita circular y obedece las leyes de Mecánica Clásica.
2. Sólo aquellas órbitas cuyo momento angular L sea un múltiplo de la constante de Planck son permitidas.

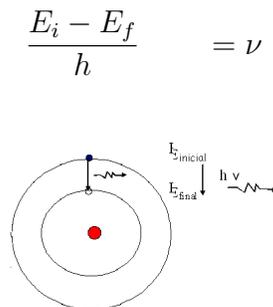
$$L = n \hbar, \quad n = 1, 2, \dots$$

3. Los electrones que se mueven en estas órbitas *no* radían ondas electromagnéticas, contrariamente a la predicción de las ecuaciones de Maxwell.
4. Sólo se emite radiación electromagnética cuando un electrón cambia de órbita. La energía emitida tiene una frecuencia

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}.$$

E_i : es la energía de la órbita de donde salió el electrón E_f : la energía de la órbita a la cual llegó.

El mecanismo de como se efectúa esta emisión no se especifica. El diagrama que la representa es:



Resolvamos entonces el átomo de Bohr usando las leyes de Newton.

$$(1) \frac{Z e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

El momento angular es

$$(2) L = m v r = n \hbar \quad (\hbar = \frac{h}{2\pi} \sim 10^{-27} \text{erg-s.})$$

Nota: $m \equiv$ masa del electron $0,9 \times 10^{-27}$ gr

Recordar que en el sistema MKS:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z e^2}{r} = \frac{m v^2}{r}$$

$e \equiv$ carga del electrón $= 1,6 \times 10^{-19}$ Coulomb, $Z \equiv$ número de protones del núcleo $\epsilon_0 = 8,86 \times 10^{-8}$ (MKS).

De estas ecuaciones debemos despejar v y r que son las incógnitas. De (1), tenemos $Z e^2 = m v^2 r = (m v r)^2 \times \frac{1}{m r}$

$$Z e^2 = \frac{h^2 \hbar^2}{m r} \Rightarrow r = \frac{n^2 \hbar^2}{m Z e^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

La velocidad es $v = \frac{n \hbar}{m r} = \frac{n \hbar}{m \frac{n^2 \hbar^2}{m Z e^2}} = \frac{Z e^2}{n \hbar}$, $v = \frac{Z e^2}{n \hbar} \quad n = 1, 2, 3, \dots$

Si $Z = 1$ y $n = 1$, $v = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} = \frac{(1,6)^2 \times 10^{-38}}{4\pi\epsilon_0 (10^{-34})} = \frac{2,6 \times 10^{-4}}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{m}{s} \right]$

$$v = \frac{2,6 \times 10^{-4}}{4\pi \times 8,86 \times 10^{-12}} = \frac{2,6}{106} \times 10^8 \sim 2,5 \times 10^6 \frac{m}{s}, \quad v \simeq 2 \times 10^8 \frac{cm}{s}.$$

La energía en el movimiento circular es

$$E = T + V = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{Z e^2}{r}.$$

El potencial utilizado es el potencial electrostático de las ecuaciones de Maxwell.

Una forma de ver estos efectos es considerar que el electrón está en reposo y el núcleo gira con una velocidad instantánea igual a v . Ya sabemos –por simples referencias cualitativas hechas en

clase-, que en ese caso aparecen campos de inducción magnética y que incluye el vector de Poynting: $\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \wedge \vec{H}$, que es distinto de cero.

Tampoco se incluyen aquí las consecuencias de Relatividad Especial. Una buena justificación para esta aproximación es notar que en el caso más extremo ($n = 1$) la velocidad orbital del electrón es una fracción de la velocidad de la luz (1 %).

De esta forma la corrección relativista existe pero es muy pequeña.

Volviendo al cálculo de la energía, tenemos:

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{Z e^2}{r} = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{m r v^2}{r}$$

$$E = -\frac{1}{2} m v^2 = -\frac{1}{2} \frac{m Z^2 e^4}{\hbar^2} \times \frac{1}{n^2}$$

$$E = -\frac{m Z^2 e^4}{2\hbar^2} \times \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Podemos calcular el valor de la energía de ligazón del electrón en la órbita más interna (permitida) del átomo de Hidrógeno.

Esta es la *energía de ionización*, la necesaria para ionizar un átomo.

$$E_{\text{ionización H}} = \frac{m e^4}{2\hbar^2} \simeq \frac{10^{-27} \times (4,8)^4 \times 10^{-40}}{2 \times (10^{-27})^2} = 225 \times 10^{-13} \text{ ergs}$$

$$1 \text{ Coulomb} = 3 \times 10^9 \text{ stat Coulomb}$$

$$1 \text{ e v} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ Coulomb} \times 1 \text{ volt} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ Joule}$$

$$= 1,6 \times 10^{-12} \text{ ergs}$$

$$E_{\text{ioniza}} = 22,5 \times 10^{-12} \text{ ergs} \times \frac{1 \text{ e v}}{1,6 \times 10^{-12} \text{ ergs}} = 13,6 \text{ e v}$$

De acuerdo a este modelo del átomo una transición entre dos estados se puede escribir como

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{2\pi\hbar} = \frac{m Z^2 e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Si evaluamos

$$\frac{m e^4}{4\pi \hbar^3} = \frac{1}{2\pi \hbar} \times \frac{m e^4}{2\pi \hbar} \times 2,25 \times 10^{11}$$

$$\frac{2,25}{2\hbar} \times \frac{10^{-11}}{\hbar} = \frac{2,25}{6,28} \times 10^{+16} \sim ,3 \times 10^{16} s^{-1}$$

Podemos relacionar esta cantidad con la constante de Rydberg

$$R = \frac{,3 \times 10^{16} s^{-1}}{3 \times 10^{10} \frac{cm}{s^{-1}}} = ,3 \times 10^6 \sim 10^5 cm^{-1}$$

$$R \sim 10^7 m^{-1} \quad (\text{Está dentro del orden de magnitud!})$$

Como la series de Balmer y las otras describían un fenómeno físico observable, uno puede entender el éxito del modelo de Bohr. La ecuación obtenida por medio de un ajuste se obtuvo aquí mediante unos postulados identificando incluso una constante (Rydberg) como una expresión algebraica de constantes físicas conocidas.

El átomo de Hidrógeno, en este sentido limitado, estaba explicado. El resto de los espectros correspondientes a otros materiales quedaba en suspenso en cuanto a su deducción, aun cuando ya prácticamente se sabía como atacar el problema. El experimento de Frank-Hertz (1914) vino a convencer al resto de la gente que todos los átomos tenían niveles de energía discretos y que no absorbían o emitían energía más que en forma discreta.

Ejemplo

En el átomo de Hidrógeno de Bohr, encuentre el número de átomos que tienen un electrón en el nivel $n = 2$, con respecto al número de átomos que están en el estado fundamental usando la estadística de Boltzmann:

$$P(E) = e^{-E/kT} \quad (\text{estadística de Boltzman})$$

Aplique este resultado al caso de una estrella cuya superficie está a una temperatura de $10^3 \text{ }^\circ\text{K}$. Cuál es la razón entre ambas poblaciones de átomos?

$$\frac{\text{número de electrones en nivel } E_2}{\text{número de electrones en nivel } E_1} = \frac{e^{-E_2/kT}}{e^{-E_1/kT}} = e^{(E_1-E_2)/kT} = e^{\frac{3}{4} E_1/kT}$$

$$E_2 = \frac{1}{4} E_1, \quad \text{pero}$$

$$\left. \begin{array}{l} E_1 = -2,2 \times 10^{-11} \text{ ergs} \\ k = 1,4 \times 10^{-16} \text{ ergs}/^\circ\text{K} \end{array} \right\} \frac{E_1}{kT} = -\frac{1,6 \times 10^5}{1,4} \sim -1,1 \times 10^5 \text{ }^\circ\text{K}$$

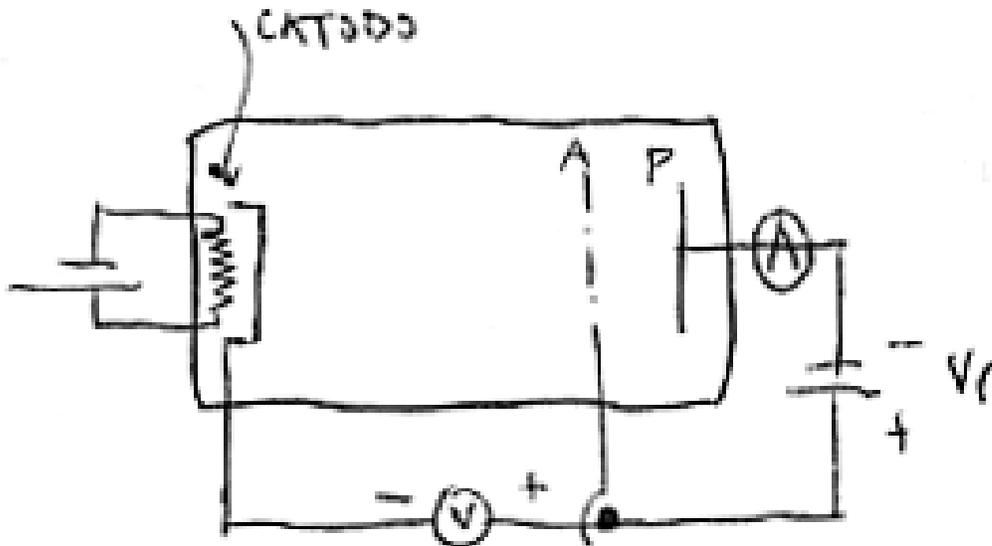
$$\frac{P(E_2)}{P(E_1)} = e^{-\frac{1,1 \times 10^5}{T}}$$

Esta expresión nos indica que en condiciones normales una ínfima cantidad de átomos se ubicará en el nivel de energía $n = 2$ a temperaturas normales. Pero que ambas poblaciones se igualarán, en caso que exista *equilibrio térmico*, a una temperatura del orden de los $10^4 K$.

Con este método se puede inferir la temperatura de la superficie de las estrellas mediante una comparación de las intensidades relativas de ambas líneas de absorción. □

VII.8.3. Experimento de Frank Hertz

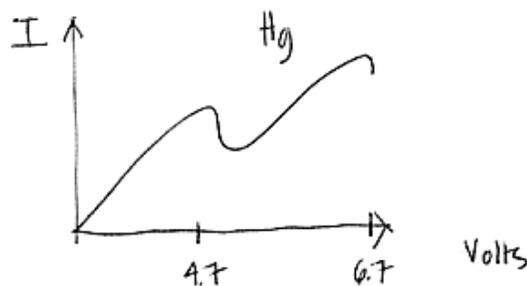
Entre las placas A y P existe un potencial retardatorio v_r . En el cátodo se producen electrones que son acelerados hacia el ánodo y algunos cruzan a través de los orificios de A hasta llegar a P si tienen suficiente energía cinética.



El experimento consiste en aumentar v con ello los electrones ganan mayor energía e incluso pueden alcanzar hasta P y uno lo sabe porque la corriente medida en el amperímetro aumenta.

En cierto punto, para un determinado valor de $v = 4,9$ Volts la intensidad de la corriente abruptamente disminuye. Al aumentar el voltaje aumenta lentamente la corriente hasta llegar a 6.7 volts y así sucesivamente.

La interpretación de este fenómeno es la siguiente. Al alcanzar la energía de 4.9 eV, los electrones son capaces de chocar con los electrones del Hg y ponerlos en el siguiente nivel de energía, perdiendo así casi toda su energía y de esta forma son incapaces de vencer el potencial v_r . Análogamente sucede para 6.7 volts. La conclusión es que el postulado de Planck es correcto, átomos de todo tipo poseen sólo ciertos niveles de energía. Frank y Hertz descubrieron como medirlos.



VII.8.4. Crítica al método de Bohr

→ Sólo indica como tratar los átomos o mejor sistemas con movimiento periódico.

→ Es una mezcla de Física Clásica y Cuántica. Arbitrariamente elimina consecuencias de las ecuaciones de Maxwell (por ejemplo la radiación)

→ Funciona para átomos con un sólo electrón. Falla para el He , por ejemplo, que tiene 2 electrones.

Estas inconsistencias de la teoría se'nalán en forma inequívoca la necesidad de mejorar la teoría.

VII.9. De Broglie: una onda asociada a cada partícula

Los siguientes pasos para para construir la mecánica cuántica que conocemos hoy fueron dados por un grupo de físicos jóvenes, algunos de ellos fueron: De Broglie, Schrodinger, Heisenberg, Born...

A continuación obtendremos la ecuación de Schrodinger. Como veremos, ésta *no* se puede deducir de los que hemos visto anteriormente. Será un conjunto de nuevas reglas con gran coherencia interna, a partir de las cuales se pueden obtener números que coinciden con los datos experimentales. Por supuesto tiene limitaciones, *no* es la teoría final –en realidad, no existe ninguna que satisfaga esta condición hasta el momento–, pero da una visión más cercana del funcionamiento de la naturaleza.

Estas nuevas reglas no contradicen la física conocida y, como toda buena teoría, presenta numerosas predicciones. Es quizás el mayor logro de la humanidad en este siglo.

De Broglie *postuló que la longitud de onda λ y la frecuencia ν de una onda se pueden asociar al momentum p y energía E de una partícula material como un electrón, protón..., mediante las siguientes relaciones:*

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \nu = \frac{E}{h}$$

Este postulado asocia un paquete de ondas con cualquier partícula. Esta afirmación fue hecha en 1924. En aquella época no existía ninguna evidencia experimental que, por ejemplo, los electrones o cualquier otra partícula, con excepción del fotón, tuviera un comportamiento ondulatorio.

VII.9.1. Paquetes de ondas

A cada partícula se le puede asociar un paquete de ondas. Para concretar esta idea, pensemos en una dimensión espacial, un paquete de ondas es una superposición de ondas planas, cada una de ellas con una longitud de onda λ , y una amplitud asociada $A(k)$, con $k = \frac{2\pi}{\lambda}$:

$$\psi(x, t) = \int A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk,$$

esta función representa una onda propagándose en la dirección positiva del eje-x. Podemos incluir (sumar) otra onda desplazándose en el sentido negativo del eje-x, pero no lo haremos para economizar expresiones matemáticas. Todo lo que se diga con respecto a la función indicada es válido para su similar. viajando en sentido opuesto.

Los valores de k o λ para los cuales $A(k)$ es distinto de cero, corresponden al ancho de banda del paquete de onda.

Velocidad de fase es la velocidad con que se mueve cada una de las ondas que componen el paquete de ondas $e^{i(kx - \omega t)}$, por lo tanto es:

$$\text{velocidad de fase} \equiv V = \lambda \nu = \frac{\lambda \omega}{2\pi} \equiv \omega/k,$$

Sin embargo la velocidad que representa la velocidad de la partícula es la denominada *velocidad de grupo*:

$$V_g = \frac{d\omega}{dk}, \quad \text{puesto que } \omega = \omega(k).$$

Esta dependencia de ω la impone la ecuación de onda. Para que una onda plana sea solución de la ecuación de onda debe cumplirse que $\omega = \omega(k)$. Esta ecuación se denomina *relación de dispersión* y esta dependencia es la que origina el desarme de un paquete de onda. Este, al desplazarse comienza a desmembrarse debido a que cada una de las ondas planas tiene una velocidad diferente debido a que la relación de dispersión no es independiente de la longitud de onda, por lo tanto a lo largo de la trayectoria se van separando entre sí o *dispersando*. Un análogo de este comportamiento ocurre en una carrera de largo aliento como lo es la maratón: allí, todos los participantes forman en la largada, un grupo compacto, sin embargo en la meta llegan muy distanciados el uno del otro, debido a las distintas velocidades que individualmente son capaces de mantener a lo largo de la carrera.

Si $\omega = k$, no existe dispersión, la velocidad de fase es la misma que la velocidad de grupo. Pero si, por ejemplo: $\omega \propto k^2$, entonces ambas velocidades son diferentes.



Ejemplo

Analicemos el caso de un tren de ondas con un espectro de banda Δk del cual tomamos una foto en $t = 0$ para facilitar el cálculo.

$$\psi(t = 0, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ikx} dk,$$

el espectro de frecuencia correspondiente es $\Delta \nu$. Si la velocidad de fase es $\lambda \nu = c$, entonces la relación con Δk está dada por $\Delta \nu = -\frac{1}{\lambda^2} \Delta \lambda = \frac{\Delta k}{2\pi}$.

Supongamos que el rango de valores entre los cuales la función $A(k)$ es diferente de cero es k_{\min} y k_{\max} . En este caso la función de onda $\psi(t = 0, x)$, adquiere la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \psi(t=0, x) &= \frac{A_o}{ix} \int_{-k_{min}}^{k_{max}} \frac{d}{dk} e^{ikx} dk = \frac{A_o}{ix} e^{ikx} \Big|_{k_{min}}^{k_{max}} \\ \psi(t=0, x) &= \frac{A_o}{ix} (e^{ik_{max}x} - e^{ik_{min}x}) \\ &= \frac{A_o}{ix} e^{i\{k_{max}+k_{min}\}x/2} \times [e^{i\{k_{max}-k_{min}\}x/2} - e^{-i\{k_{max}-k_{min}\}x/2}] \\ &= \frac{2 A_o (k_{max} - k_{min})}{x (k_{max} - k_{min})} e^{i\{k_{max}+k_{min}\}x/2} \operatorname{sen} \left(\frac{k_{max} - k_{min}}{2} x \right) \\ \bar{k} &= \frac{1}{2}(k_{max} + k_{min}), \quad \Delta k = \frac{k_{max} - k_{min}}{2} \\ \psi(t=0, x) &= 2 A_o \Delta k e^{i\bar{k}x} \left(\frac{\operatorname{sen} \Delta k x}{\Delta k x} \right). \end{aligned}$$

Porque es fundamental en su aplicación a la mecánica cuántica, nos interesa $|\psi^2|$:

$$|\psi|^2 = 4 A_o^2 \Delta k^2 \frac{\operatorname{sen}^2 \Delta k x}{(\Delta k x)^2}.$$

Como $e^{i\bar{k}x}$ oscila más rápidamente que $\operatorname{sen} \Delta k x$. Podemos considerar a $\left(\frac{\operatorname{sen} \Delta k x}{\Delta k x} \right)$ como la *envolvente* de dicha función.

El máximo de esta amplitud decae como $1/x$ con la distancia y toma el valor $(2 A_o \Delta k)$ en $x = 0$.

El primer máximo ocurre en $x = 0$. Los siguientes máximos de la amplitud ocurren para:

$$\Delta k x = (2n - 1) \frac{\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad x = \frac{(2n - 1)\pi}{2\Delta k}$$

La amplitud allí es $\frac{4 A_o}{(2n - 1)\pi}$

La amplitud al cuadrado disminuye como $1/n^2$. El máximo que la onda está concentrado entre:

$$\Delta k a = \pi, \quad \text{allí ocurre que se cumple: } \Delta k \Delta x = 2\pi, \quad (\text{con } \Delta x = 2a).$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \left(\frac{h}{2\pi} \right) \cdot \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) = \hbar k$$

$$\Delta p = \hbar \Delta k, \quad \hbar \Delta k \Delta x = \Delta p \Delta x = h.$$

Este es un resultado de validez general y aun cuando lo hemos encontrado a partir de un paquete de onda, corresponde a un principio de la física microscópica, el *Principio de Incertidumbre* de Heisenberg.

Cuando lo aplicamos a un paquete de onda que no corresponde a un caso tan particular como el planteado en este ejemplo, la ecuación se transforma en una desigualdad. La expresión general del principio de incertidumbre es:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h.$$

Análogamente ocurre en las otras dimensiones:

$$\Delta y \Delta p_y \geq h, \quad \Delta z \Delta p_z \geq h.$$

Si hacemos un análisis similar de la ecuación $\psi(x, t)$, pero en lugar de tomar una foto de la onda en $t = 0$, nos ubicamos en punto fijo, digamos $x = 0$, y analizamos qué sucede con la onda, obtendremos una relación similar a la anterior, pero ahora entre la energía y el tiempo:

$$\Delta E \Delta t \geq h.$$

Heisenberg postuló que estos resultados no eran una simple coincidencia ni tampoco constituían una debilidad técnica al medir fenómenos microscópicos, sino que *constituían un principio inherente a la naturaleza*.

En otras palabras, se afirma que no es posible determinar la posición y el momentum de una partícula en forma simultánea con una precisión menor que el límite señalado por el *principio de incertidumbre*. También se señala que es posible *no* respetar el principio de conservación de la energía pero sólo en un periodo de tiempo tal, que se respete la desigualdad $\Delta t \cdot \Delta E \geq h$.

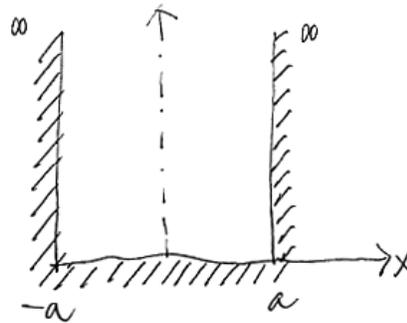
Ejemplo

El caso de una partícula en una caja de potencial con paredes impenetrables es quizás uno de los más ilustrativos. Sin conocer aún la ecuación de Schrodinger podemos –mediante el uso del principio de incertidumbre– *estimar un valor aproximado* para la energía mínima, que resulta ser distinta de cero. No debemos olvidar que estos cálculos representan sólo órdenes de magnitud.

Tomando el valor mínimo para la incertidumbre, tenemos:

$$2a \cdot \Delta p_x \simeq h.$$

De acuerdo a la definición de Δx , tenemos:



$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$

Como $\langle p_x \rangle = 0$, de acuerdo a la simetría del problema en el nivel más bajo de energía, tenemos:

$$\Delta p_x \sim \sqrt{\langle p_x^2 \rangle} \sim \bar{p},$$

donde \bar{p} representa un número asociado al valor del momentum de la partícula en el interior del potencial. Reemplazando en la ecuación anterior tenemos:

$$2a\bar{p} = n\hbar/2, \quad \frac{\bar{p}^2}{2m} \equiv E = \frac{\hbar^2}{(2a)^2 \cdot 2m}, \quad \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} = E_{min}, \Rightarrow E_{min} \sim \frac{\hbar^2}{8ma^2}.$$

La respuesta correcta obtenida resolviendo la ecuación de Schrodinger es

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{8ma^2}\right) \cdot n^2, \quad \text{con } n = 1, 2, \dots$$

Ejemplo

También podemos obtener una estimación de la energía del electrón de Bohr en su órbita más cercana al núcleo atómico, utilizando el mismo método de estimaciones realizado en el ejercicio anterior.

Escribamos el Principio de Incertidumbre en la siguiente forma:

$$r p \sim \hbar,$$

escrita de esta forma, obtendremos el mismo valor que caracteriza al átomo de Bohr. Reemplazando esta expresión en la ecuación de la energía, obtenemos:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2 p}{\hbar}.$$

Como existen muchos estados posibles, suponemos que el electrón se ubicará en el de menor energía, como es lo habitual en la naturaleza. Encontramos este mínimo:

$$\frac{\partial E}{\partial p} = 0 = \frac{p_o}{m} - \frac{e^2}{\hbar} \Rightarrow$$

$$p_o = \frac{m e^2}{\hbar}, \quad r_o = \frac{\hbar^2}{m e^2}.$$

Reemplazando estos valores en la ecuación de la energía:

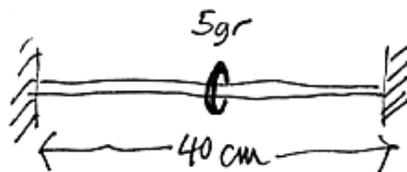
$$E = \frac{p_o^2}{2m} - \frac{e^2 p_o}{\hbar} = -\frac{e^4 m}{2\hbar^2} = -R_\infty \quad \text{Constante de Rydberg.} \square$$

Lo que sucede en estos dos últimos casos de acuerdo al Principio de Incertidumbre, es lo siguiente: al tratar de confinar el electrón (o la partícula en el caso anterior), éste reacciona adquiriendo más momentum: si r disminuye, entonces p aumenta, tornándose más difícil recluir el electrón en un volumen pequeño. El equilibrio ocurre, en este último caso para el valor del radio de Bohr para $n = 1$.

A continuación veremos que los números que debemos usar son muy pequeños y por tanto no tienen la menor posibilidad de ser observados en un objeto macroscópico como el que se describe a continuación.

Ejemplo

En los ejemplos anteriores, donde el mínimo de energía de la partícula *no* ocurre para el reposo nos hace preguntarnos que sucede con un aro en reposo en un alambre sin roce rodeado de dos murallas.



Si los cálculos realizados anteriormente son correctos, el aro no puede permanecer en reposo y debe tener la energía mínima asociada con el número encontrado para una partícula confinada en un pozo de potencial infinito.

Estimemos cuánto se demora la partícula en chocar contra la muralla:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m a^2} = \frac{(1,05 \times 10^{-34} \text{Joule})^2}{2 \times 10^{-3} \times 5} \cdot (\pi/0,4)^2 = 6,8 \times 10^{-65} \text{Joule}.$$

La velocidad de la partícula obtenida a partir de esta fórmula es:

$$V = \left(\frac{2 E_1}{m} \right)^{1/2} \sim \left(\frac{13 \times 10^{-66}}{5 \times 10^{-3}} \right)^{1/2} = (272 \times 10^{-64})^{1/2} \sim 16 \times 10^{-32} \text{ m/s},$$

el tiempo que demora en alcanzar uno de los extremos es:

$$T = \frac{2 a}{V} = \frac{0,4}{1,6 \times 10^{-31}} = 0,25 \times 10^{31} \text{ s}.$$

Por otra parte si $V = 2m/s \Rightarrow n \sim 10^{31}$, donde n es el nivel de energía asociado al pozo infinito que estamos examinando. A estos niveles de energía la mecánica cuántica ofrece los mismos resultados que la mecánica clásica. □

A continuación veremos que un cálculo estimativo utilizando el principio de incertidumbre permite recuperar –en orden de magnitud– la densidad de un objeto de la vida diaria, un pedazo de tiza por ejemplo.

El equilibrio que se propone a continuación es entre estos dos actores: la atracción Coulombiana que tiende a concentrar los electrones en un cristal, en la vecindad de un ión y el Principio de Incertidumbre que tiende a impedir que el electrón se concentre en un punto en la vecindad del ión. En esta estimación propondremos que la densidad de energía Coulombiana sea igual a la presión que ejercen los electrones sobre una pared imaginaria al rebotar con mayor velocidad a mediada que se minimiza el espacio accesible.

Ejemplo

Supongamos que un pedazo de tiza está constituido por una cadena de iones que se asocian –cada uno– a un electrón. Demuestre que el punto de equilibrio entre los espacios relativos en esta red corresponde a una densidad del orden de los gramos por centímetro cúbico.

El equilibrio ocurre cuando el ión trata de fijar la posición del electrón lo más próximo posible y el electrón responde aumentando su momento –de acuerdo al Principio de Incertidumbre–, a medida que se restringe su libertad de movimiento. Podemos estimar un orden de magnitud para

la distancia a la cual se mantiene el ion y el electrón igualando ambas densidades de energía (Coulombiana y Cinética). Con este número podemos –a su vez–, estimar la densidad promedio de los cuerpos que se mantienen en equilibrio mediante un mecanismo similar al presentado.

Nos concentraremos en el caso no relativista: $p \ll mc$, definiendo la densidad de partículas como $n \equiv \frac{\# \text{ de fermiones}}{\text{unidad de volumen}}$.

Los fermiones son partículas que obedecen el *Principio de Exclusión de Pauli*. Este principio indica que dos fermiones, con los mismos números cuánticos *no* pueden ocupar la misma posición.

Ejemplos de partículas elementales que siguen este comportamiento son los electrones, los protones, neutrones, neutrinos... entre las más conocidas.

Como el cálculo que sigue es primordialmente cualitativo, es decir, nos interesan los órdenes de magnitud de las cantidades involucradas más que su valor exacto, supondremos por el momento, que un electrón tiende a rechazar a otro electrón que intenta ubicarse en su vecindad. En rigor, como los electrones tienen spin $\pm 1/2$, es posible acomodar dos electrones en un sólo sitio. Lo que haremos es duplicar el número de electrones al final del cálculo.

Volviendo al cálculo inicial, supondremos que cada electrón ocupa un volumen $\left(\frac{1}{n}\right) \text{ cm}^3$.

Por ejemplo: $\frac{3 \text{ partículas}}{1 \text{ cm}^3} \Rightarrow$ cada partícula ocupa un volumen de $\frac{1}{3} \text{ cm}^3$.

Supongamos que la partícula está confinada a un cubo, es decir esta rebotando en las paredes de esta celda imaginaria, entonces: $\langle p \rangle = 0$ y

$$\Delta p \equiv [\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle]^{1/2} = \sqrt{\langle p^2 \rangle} \equiv \bar{p}, \quad \Delta x = \bar{x} \sim \left(\frac{1}{n}\right)^{1/3}.$$

Donde \bar{x} es una distancia *asociada* a la amplitud de movimiento de la partícula. Análogamente \bar{p} representa un momentum asociado al movimiento de dicha partícula. Aplicando el Principio de Incertidumbre, tenemos:

$$\bar{p}_x \cdot \left(\frac{1}{n}\right)^{1/3} \sim \hbar, \quad \text{de aquí } \bar{v}_x \sim \frac{\hbar n^{1/3}}{m},$$

ahora estamos en condiciones de evaluar la presión que ejerce el electrón sobre las paredes de su celda:

$$p = \frac{F}{A} = \frac{2 p_x}{A \cdot \Delta t} \cdot N \times \frac{\Delta x}{\Delta x}$$

Donde N es el número de partículas. El momentum es:

$$\simeq p_x \left(\frac{N}{A \cdot \Delta x} \right) \cdot v_x \sim p_x n \cdot v_x, \quad \text{la presión es} = \hbar n^{4/3} \cdot v_x = \hbar n^{4/3} \cdot \frac{\hbar n^{1/3}}{m}$$

$$\boxed{\text{presión} = \frac{\hbar^2 n^{5/3}}{m_e}}$$

Los electrones confinados en su celda reaccionan ejerciendo dicha presión sobre estas paredes imaginarias. La fuerza de atracción que se contrapone a esta presión proviene de los iones de la red que procuran mantener confinados en su territorio a los electrones. La densidad de energía electrostática es:

$$U \propto \frac{e^2}{a}, \quad (\text{Energía electrostática}).$$

Por ejemplo, la energía electrostática de un cristal de NaCl es $1,747 e^2/a$. Ver Feynman Lectures on Physics, Vol II, sección 8-3.

De aquí podemos obtener un orden de magnitud para la fuerza y la presión:

$$F \sim \frac{e^2}{a^2}, \quad p = \frac{F}{A} \sim \frac{e^2}{n^{-2/3}} \cdot \frac{1}{n^{-2/3}} \sim e^2 n^{4/3}.$$

El balance de estas dos presiones nos da la siguiente ecuación:

$$e^2 n^{4/3} = \frac{\hbar n^{5/3}}{m_e} \Rightarrow n^{1/3} = \frac{e^2 m_e}{\hbar^2}, \quad \text{despejando } n:$$

$$n = \frac{e^6 m_e^3}{\hbar^6} \left[\frac{\# \text{ de partículas}}{\text{unidad de volumen}} \right].$$

La densidad se obtiene multiplicando este número n por la masa de los protones que son las partículas con mayor masa:

$$\rho = \frac{e^6 m_e^3 m_p}{\hbar^6}, \quad \text{evaluando esta cantidad se obtiene } : \rho \sim 1 \frac{gm}{cm^3}.$$

Podemos suponer con cierta base entonces, que los objetos que nos rodean y que tienen una densidad dentro de este orden de magnitud, han alcanzado esta densidad debido al equilibrio que hemos señalado.

Nota: los cálculos fueron realizados en el sistema CGS de unidades. En el sistema MKS, debemos utilizar $e^2/[4\pi\epsilon_0]$. □

Finalmente estudiaremos el experimento de la doble rendija. Para analizar este experimento debemos repasar lo que sucede con una onda al atravesar una –o varias– rendijas. El fenómeno que aparece se denomina difracción o interferencia.

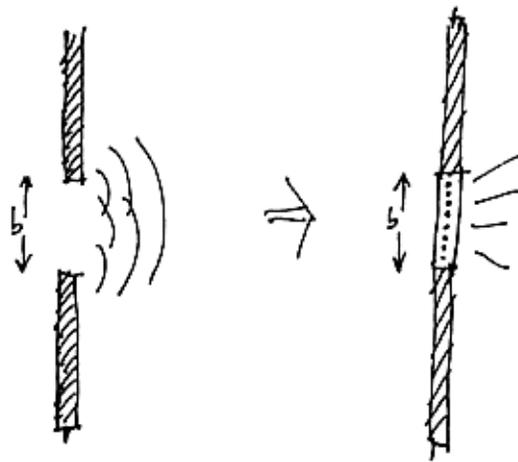
VII.9.2. Difracción de una Ranura

Modelamos la ranura como N fuentes puntuales con una separación a entre ellas. Para simular la ranura, tomamos el límite

$$N \rightarrow \infty, \quad a \rightarrow 0, \quad \text{tal que:}$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} N \cdot a = b,$$

donde b es el ancho de la ranura.



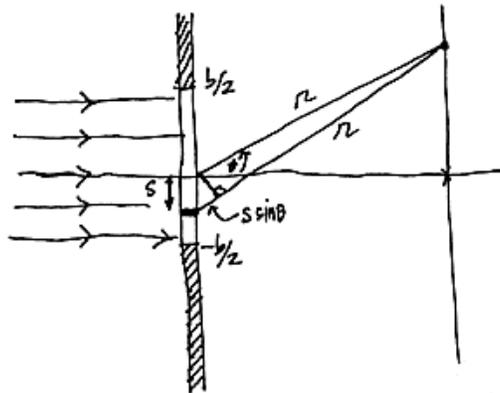
Esto corresponde al caso en que el ancho de la rendija es más ancho que la longitud de onda que lo atraviesa. Una rendija fabricada con una hoja de afeitar es mucho más ancha que la longitud de onda de la luz visible: $\lambda \sim 10^3 - 10^4 \text{ \AA}$ o en nanómetros $\lambda \sim 10^2 - 10^3 \text{ nm}$.

Calculemos la superposición de ondas en la pantalla de acuerdo a lo que se ilustra en la Figura.

Supongamos que dE es la intensidad del campo eléctrico considerado como una flecha perpendicular al plano del papel. ds indica la zona de donde proviene dicho campo. El valor de la intensidad del campo eléctrico es:

$$dE = A \frac{e^{-ik(r+s \sin \theta)}}{r} ds, \quad E(\theta) = A \frac{e^{-ikr}}{r} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} e^{-i k s \sin \theta},$$

$$E(\theta) = A \frac{e^{-ikr}}{r} \times 2 \frac{\text{sen}[(k b \sin \theta)/2]}{i k \sin \theta}, \quad \text{si } \beta \equiv \frac{1}{2} k b \sin \theta,$$



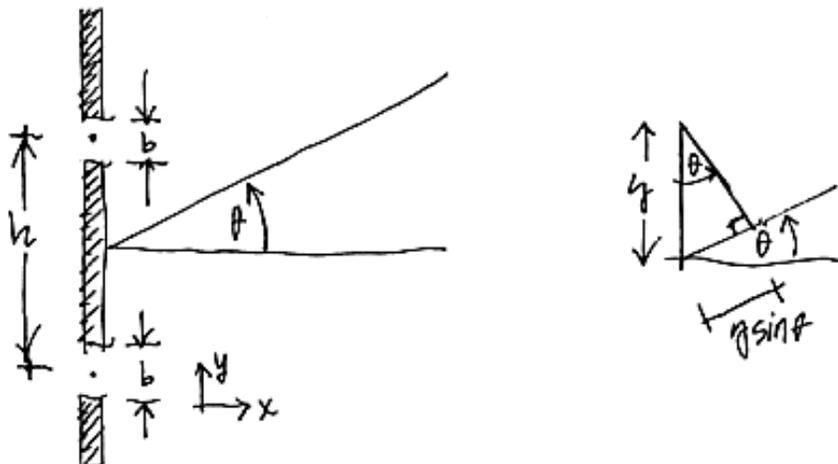
entonces $E(\theta) = \frac{A b}{r} e^{-i k r} \left(\frac{\text{sen } \beta}{\beta} \right)$.

La intensidad $I(\theta)$ de la onda en la pantalla, se define como el módulo al cuadrado de la amplitud de la onda:

$$I(\theta) = \frac{I_0 b^2}{r^2} \left(\frac{\text{sen } \beta}{\beta} \right)^2, \quad \text{con } \frac{\lambda}{b} \ll 1.$$

Interferencia debida a dos ranuras

La interferencia producida por dos rendijas anchas está *modulada* por la interferencia generada por una rendija.



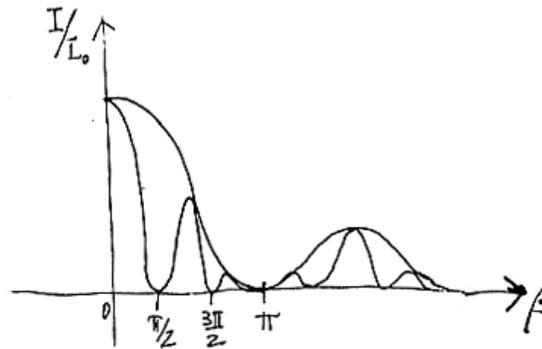
$$\begin{aligned}
 \int e^{i k y \text{ sen } \theta} dy &= \int_0^b e^{i k y \text{ sen } \theta} dy + \int_h^{h+b} e^{i k y \text{ sen } \theta} dy \\
 &= \frac{1}{i k \text{ sen } \theta} [e^{i k b \text{ sen } \theta} - 1 + e^{i k (h+b) \text{ sen } \theta} - e^{i k h \text{ sen } \theta}] \\
 &= \frac{1}{i k \text{ sen } \theta} \cdot (e^{i k b \text{ sen } \theta} - 1) (1 + e^{i k h \text{ sen } \theta})
 \end{aligned}$$

$$\int_A e^{i k y \text{ sen } \theta} dy = 2b \frac{e^{i(\beta+\gamma)}}{\beta} \text{ sen } \beta \cos \gamma$$

Lo que se hizo en este cálculo fue sumar las contribuciones de las ondas de campo eléctrico mientras mantenemos congelada su evolución. Suponemos que los campos son perpendiculares al plano del papel.

Todas las ondas tienen la misma polarización debido a que la onda incidente es una onda coherente total: toda la onda incidente tiene la misma fase y la misma longitud de onda.

Lo que en realidad importa es la intensidad de la onda y ésta es la función que graficamos a continuación.



$$\beta = \frac{1}{2} k b \text{ sen } \theta \simeq \pi \frac{b}{\lambda} \theta$$

$$\gamma = \frac{1}{2} k h \text{ sen } \theta \simeq \pi \frac{h}{\lambda} \theta$$

$$\text{Si } \theta \ll 1, \quad \text{sen } \theta \sim \theta$$

$$\begin{aligned}\cos \gamma = \pm 1 &\Rightarrow \pi \frac{h}{\lambda} \theta = N \pi \\ \Rightarrow \theta_\gamma &= \frac{N\lambda}{h}, \quad \frac{\lambda}{h}, \quad \frac{2\lambda}{h}, \quad \frac{3\lambda}{h} \dots\end{aligned}$$

$$\text{sen } \beta = 1 \Rightarrow \pi \frac{b\theta}{\lambda} = (2m+1) \frac{\pi}{2}, \quad \text{si } \beta \neq 0, \quad \Rightarrow \theta_\beta = (2m+1) \frac{\lambda}{2b} : \quad \frac{\lambda}{2b}, \quad \frac{3\lambda}{2b}, \quad \frac{5\lambda}{2b}$$

Como se cumple $\lambda < b < h \Rightarrow \frac{h}{\lambda} > \frac{b}{\lambda} \Rightarrow \cos \gamma$ oscila más rápido que $\text{sen } \beta$ ($\beta \neq 0$).

de modo que $\frac{\text{sen}^2 \beta}{\beta^2}$ forma la envolvente de $\cos^2 \gamma$.

¿Qué sucede con el principio de incertidumbre en esta configuración? Recordemos que en el caso minimal $\Delta y \Delta p_y \sim h$.

$$\frac{\sqrt{\Delta p_y}}{p_o} \sim \tan \Delta \theta \quad (\Delta p_y)^2 = \frac{1}{N} \sum_i (p_i|_y - \langle p_i \rangle_y)^2 = \frac{\sum p_i^2|_y}{N}$$

$$\sqrt{\overline{p_y^2}} \sim \Delta \theta p_o = \Delta \theta \frac{h}{\lambda}$$

Reemplazando estas cantidades en el principio de incertidumbre, tenemos

$$\begin{aligned}\Delta y \cdot \Delta p_y &= d \cdot \Delta \theta \frac{h}{\lambda} \approx h \\ \Rightarrow \Delta \theta &= \frac{\lambda}{d}\end{aligned}$$

Este resultado coincide con el encontrado arriba mediante el uso de óptica geométrica.

Si cubrimos una de las rendijas entonces sólo permanece la difracción correspondiente a una rendija con su parámetro típico: $\frac{\lambda}{b}$. Lo mismo sucede cuando cerramos (1) y abrimos la rendija (2).

Al abrir ambas rendijas, el resultado *no* es la suma de ambas. Este comportamiento resulta extraño si pensamos en los fotones como partículas o en los electrones mismos. Se puede explicar si asociamos un comportamiento oscilatorio a ambas partículas o si las suponemos partículas pero, de acuerdo al principio de incertidumbre, no las podemos localizar con una precisión mayor que la distancia entre las rendijas. Además de esta característica debe suponer que cada uno de los caminos posibles adoptados por la partícula interfiere con el resto. De esta

forma adoptando el punto de vista de partículas se puede explicar la interferencia observada al pasar por las rendijas.

Si definimos una probabilidad asociada a la intensidad de la onda:

$$P_1 \equiv |\phi_1|^2, \quad P_2 = |\phi_2|^2, \quad P_{12} = |\phi_1 + \phi_2|^2,$$

$P_i \equiv$ intensidad de la onda que proviene de la rendija i -ésima.

El resultado de este experimento indica que al detectar la partícula, ésta se comporta como tal, pero la probabilidad de medir la partícula se comporta como una onda.

Si observamos los electrones (u otra partícula: fotón,...) mediante cualquier medio que permita decidir por cuál rendija cruzó, *esta medición destruye la interferencia*. En este caso la probabilidad de detectar la partícula se transforma en la suma de las probabilidades:

$$p_{12} = p_1 + p_2 = |\phi_1|^2 + |\phi_2|^2, \quad \text{No hay interferencia.}$$

A continuación volvemos sobre este experimento con más detalle. (Ver Feynman, Vol III, cap 1).

VII.9.3. El experimento de la doble rendija

Asociando una partícula con un paquete de ondas, automáticamente se pierde información acerca de la posición exacta de la partícula y de su momentum. Todo esto en conformidad con el *principio de incertidumbre*. De hecho, este principio fue motivado a partir del análisis de un paquete de ondas.

Mediante el empleo de un par de ejemplos, pudimos apreciar que se verificaba la siguiente desigualdad:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar.$$

Fue Heisenberg quien introdujo este principio físico: la imposibilidad de determinar en forma exacta la posición y el momentum *simultáneamente*.

El siguiente ejemplo (R. Feynman, Vol. III, Cap. I y II) ilustra las consecuencias de este principio en el comportamiento de los electrones. El experimento utilizado corresponde al paso de una partícula a través de una rendija doble. Analizaremos –a través de un experimento pensado–, el comportamiento de tres elementos diferentes: la luz, unas esferas y electrones. El caso de la luz ya ha sido descrito anteriormente, pero lo repetiremos brevemente aquí.

Lo que se mide al proyectar el haz de luz monocromática y coherente en la pantalla sensible a la luz, lo que se determina es la *intensidad de la luz*:

$$I_{12} = |h_1 + h_2|^2.$$

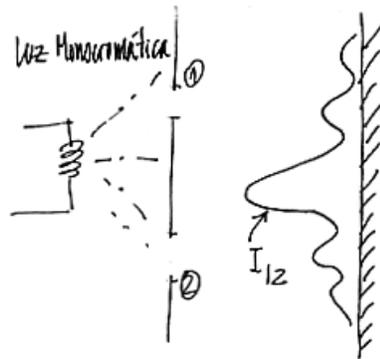
Al tomar módulo de la suma de ambas cantidades, aparece la interferencia producida por la interacción entre los dos rayos que cruzaron cada una de las rendijas.

Si se obstruye uno de los orificios tenemos una sola intensidad: I_1 o I_2 , dependiendo de cual de ellos haya sido obstruído. El hecho que

$$I_{12} \neq I_1 + I_2 \Rightarrow \text{Interferencia}$$

$$I_{12} = |h_1|^2 + |h_2|^2 + 2|h_1||h_2|\cos\delta.$$

Δ corresponde a la diferencia de fase entre las dos ondas.



Otro caso que mencionaremos brevemente es el caso de las bolitas de cristal. En este caso no hay interferencia. La dispersión que se observa cuando la ventanita 1 está cerrada es I_1 y análogamente, la intensidad I_2 se debe a los proyectiles que se lanzan al azar. Al dejar ambos rendijas accesibles, se obtiene $P_{12} = P_1 + P_2$. No aparece aquí la interferencia.

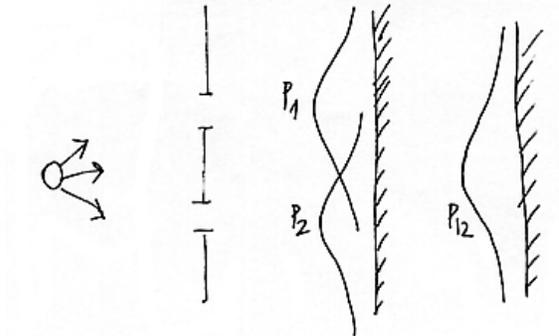
Veamos a continuación que las esferitas que hemos denominado electrones tienen un comportamiento muy especial.

$$P_1 = |\phi_1|^2, \quad P_2 = |\phi_2|^2 \quad P_{12} = |\phi_1 + \phi_2|^2$$

Note que ϕ_1 , corresponde a la amplitud h_1 , ... escrita anteriormente. Conviene escribirla como un número complejo.

Si dejamos un orificio abierto y paseamos el detector por la pared, observamos el mismo comportamiento obtenido a partir de los proyectiles.

Lo más interesante sucede si dejamos ambas rendijas abiertas y se permite el paso de ambos electrones: aparece un diagrama de interferencia similar a aquel observado con las ondas. Lo



espectacular es que este diagrama aparece aún si se disminuye la intensidad de los proyectiles hasta alcanzar límites muy bajos en intensidad. Lo que ocurre en este caso es que el número de click's disminuye pero *no así* su distribución sobre la pantalla que mantiene su forma. En otras palabras, si fuese posible enviar los electrones uno a uno, la estructura de la interferencia aún se mantiene.

Ahora si ponemos un detector justo detrás de cada una de las rendijas, estos detectores *nunca* hacen click simultáneamente. Simultáneamente se destruye el sello de la interferencia en la pantalla. Cuando determinamos por cual rendija viajó el electrón, se acaba la incerteza y el electrón adopta una sola trayectoria.

Cuando no se investiga la trayectoria de los electrones, éstos se comportan como si el mismo electrón se multiplicara y atravesara simultáneamente por ambas rendijas y, además interfiriendo consigo mismo.

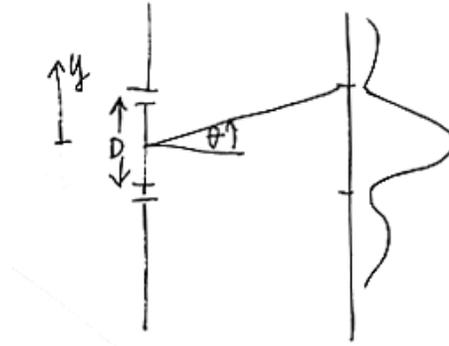
No tiene sentido preguntarse si el electrón se fue por la ranura 1 ó utilizó la alternativa 2. No debemos intentar explicar en forma clásica este comportamiento. Basta con aplicar nuestra representación ondulatoria para el electrón y sacar de allí las conclusiones. La mecánica cuántica es un formalismo que da respuestas concretas y correctas a un conjunto de preguntas físicas. No puede pretender dar una explicación clásica del origen de su comportamiento.

Veamos cómo la mecánica cuántica describe la situación del electrón en este experimento: los electrones al atravesar por las rendijas estamos fijando una cota a la incertidumbre asociada a la posición del electrón. Esta es D , la distancia entre las rendijas. Sabemos que el ancho de la interferencia está dado por $(p_o \Delta \theta)$

pero $\Delta \theta = \frac{p_y}{p_o}$, p_o es el módulo del momentum y p_y es la componente en la dirección y .

De aquí $p_y = p_o \Delta \theta$, por óptica geométrica. Por otro parte $\Delta \theta = \lambda/D$, entonces $p_y = p_o [\lambda/D]$ y utilizando el postulado de De Broglie

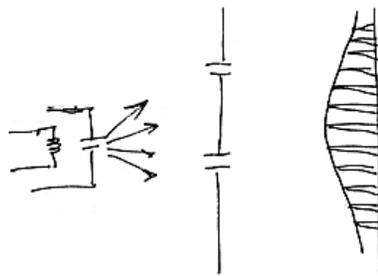
$$D p_y = \lambda p_o = h.$$



En resumen, el diagrama de interferencia se deduce fácilmente del comportamiento ondulatorio de las partículas. Con la introducción del principio de incertidumbre de Heisenberg, el comportamiento de partículas y ondas se hace compatible.

Se sabe que si uno angosta la rendija, el espectro de una onda se hace más ancho. Por otra parte usando el Principio de Incertidumbre si $\Delta y \downarrow 0 \Rightarrow \Delta p_y \uparrow \infty$, por lo tanto el espectro es más ancho.

La longitud de onda es tan pequeña que uno simplemente observa la envolvente y no la serie de máximos y mínimos. *Más aún*, lo mismo debió observarse cuando enviamos proyectiles macroscópicos a través de las rendijas. Allí nuevamente como $\lambda = \frac{h}{(mv)} \lll 1$ no es posible (con el tamaño de nuestro detector) seguir los altos y bajos del diagrama de Interferencia.



Tenemos ya el nuevo esquema que nos permitirá ver la naturaleza incluyendo los fenómenos atómicos. Surge un modelo que unifica lo microscópico (los electrones) con lo macroscópico (las bolitas usadas como proyectiles) y que en su emerger arrastra un sin número de predicciones.

Nos queda un paso todavía: expresar estos resultados a través de una ecuación para tener una descripción cuantitativa de estos principios y poder comparar con las observaciones.

VII.10. Ecuación de Schrodinger

La ecuación de Schroedinger no es un desarrollo directo o generalización de alguna teoría previa. Es una teoría nueva que cambió muchos de los paradigmas de la física clásica. Incorpora, entre otras, una herramienta matemática nueva: los operadores que representarán a las cantidades físicas susceptibles de ser medidas, como por ejemplo el momentum. Estos operadores actúan sobre un espacio vectorial, que es la amplitud de probabilidad. Estos operadores deben ser hermíticos para tener autovalores reales que permitan una interpretación física.

Para dar forma a esta ecuación utilizaremos como guía, la conservación de la energía. Definimos la amplitud de probabilidad como una onda plana. De esta forma podemos definir los operadores momentum y posición. Debe quedar claro que esta es sólo una muletilla, no un proceso que detalla el origen de la ecuación. Se sugiere la siguiente representación:

$$\text{La energía total es} \quad \rightarrow \quad E = \frac{P^2}{2m} + V(x).$$

$$\text{De acuerdo al principio de de Broglie, el momentum es:} \quad \rightarrow \quad P = \frac{h}{\lambda}.$$

$$\text{La energía, de acuerdo a la hipótesis de Einstein es:} \quad \rightarrow \quad E = h\nu$$

Schrodinger *inventó* una ecuación de onda que respeta estas relaciones. Mantenemos que la función de onda (o amplitud de probabilidad de acuerdo a su interpretación) debe ser exponencial y compleja:

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{función de onda}) \quad (\text{VII.2})$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad E = \hbar \omega = \frac{h}{2\pi} \omega = h\nu \quad (\text{VII.3})$$

$$\Psi(x, t) = A e^{2\pi i \left(\frac{1}{\lambda} x - \frac{E}{h} t \right)} \quad (\text{VII.4})$$

$$= A e^{i \frac{2\pi}{h} (p x - E t)} \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{VII.5})$$

Lo que queremos obtener es el operador momentum P tal que actuando sobre la función de onda de como autovalor el momentum p asociado a esta onda plana. Para sacar p del argumento podemos derivar con respecto a la posición y a partir de este resultado definir el operador momentum P . Queremos $P \Psi = p \Psi$:

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \psi(x, t) \Rightarrow \boxed{P \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}}$$

Procedemos de la misma forma para obtener otro observable: la energía. Para bajar la energía de la función de onda podemos derivar con respecto al tiempo. Definimos el Hamiltoniano, H como:

$$-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi, \quad H \equiv -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$$

$$-\frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{(2\pi)^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} \psi$$

$$V(x, t)\psi(x, t) = V(x, t)\psi(x, t)$$

Copiando la conservación de la energía

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

y reemplazando las cantidades por sus respectivos operadores, tenemos la ecuación diferencial siguiente:

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

Esta la Ecuación de Schrödinger en 1-dimensión. En 3 - dimensiones, la ecuación es la siguiente:

$$\boxed{\text{quad} \left[-\hbar i \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}, t) \right] \Psi(\vec{x}, t)}$$

Recordemos que $\Psi^*(\vec{x}, t)$ es el complejo conjugado de $\Psi(x, t)$. Puedo entonces multiplicar la ecuación anterior por Ψ^* por la izquierda. En seguida, tomar el complejo conjugado de la

ecuación de Schrödinger y multiplicarla por la izquierda con $\Psi(x, t)$.

$$\Psi^* \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi = \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi$$

$$\Psi \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi^* = \Psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi^*$$

Restando ambas ecuaciones, obtengo:

$$-\frac{\hbar}{i} (\Psi^* \partial_t \Psi + \Psi \partial_t \Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\nabla \cdot (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi) - \nabla \cdot (\Psi \vec{\nabla} \Psi^*) \right]$$

Designamos $P \equiv \Psi^* \Psi = |\Psi|^2$, de esta forma la ecuación puede escribirse como una de continuidad:

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}},$$

con

$$\vec{J} \equiv \frac{1}{i} \frac{\hbar}{2m} \left[\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right].$$

Cuando Schrödinger inventó su ecuación y la aplicó al átomo de Hidrógeno supuso $P \equiv \Psi^* \Psi$ representaba la densidad de carga y \vec{J} la densidad de corriente. Fue **Born** quien interpretó (correctamente) esta ecuación diciendo que

$$P(x, t) d^3 \vec{x} \equiv \Psi^*(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) d^3 x$$

representaba la probabilidad de encontrar una partícula en el volumen v .

La ecuación $\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}$ tiene la interpretación usual, la variación de la probabilidad P en un elemento devolumen es igual al flujo de probabilidad que se escapa (o penetra!) a través de las paredes del volumen especificado.

La ecuación de Schrödinger puede ser generalizada a cualquier caso de interés físico si la escribimos como

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi,$$

donde $H \equiv$ Hamiltoniano del problema $= \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$ con $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$, un operador actuando sobre la función que uno ponga a la derecha de él. La energía \hat{H} se ha escrito aquí en la aproximación **no**-relativista por simplicidad.

Si tenemos una partícula atrapada en una caja, $P \equiv \Psi^* \Psi$ debe ser una constante en el interior de la caja puesto que la probabilidad de encontrar una partícula en cualquier punto interior es constante. Esto se logra fácilmente si $\Psi = A e^{-i/\hbar(Et + \vec{p} \cdot \vec{x})}$

Antes de resolver la ecuación de Schrödinger para algunos casos típicos, mostraremos el comportamiento de la mecánica cuántica en forma cualitativa. Ver Feynman Vol III, sección 7-3.

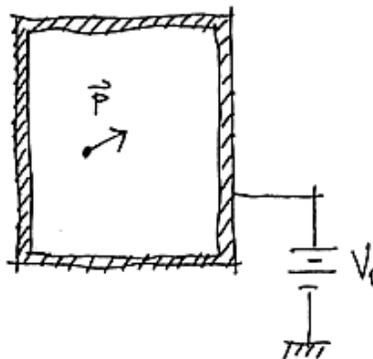
Considere una partícula encerrada en una caja metálica. Si conectamos la caja a un potencial v_0 que sucede con la función de onda de la partícula?

La función de onda de la partícula en la caja debe ser proporcional a:

$$e^{-i/\hbar(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}$$

$E \equiv$ indica toda la energía de la partícula

$$E = \frac{p^2}{2m} + v_0 \quad (\text{suponemos que la part. no tiene estructura interna})$$



De modo que $E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} + V_0$, como V_0 es una constante de forma que $\Psi(x, t)$ sólo cambia de fase y $e^{-i/\hbar V_0 t}$ y la probabilidad de encontrar a la partícula en las inmediaciones del punto P es exactamente la **misma** que sin la presencia del potencial V_0 constante al interior.

¿Qué sucede si hay un cambio brusco en el potencial? Supongamos, para simplificar, que se trata de un problema unidimensional.

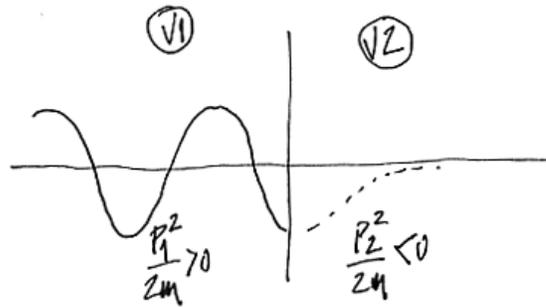


Figura VII.9: El salto brusco del potencial es un modelo (fenomenológico) que representa la presencia de la pared de la caja. La partícula viaja libremente hasta alcanzar el muro. Clásicamente, rebota, sin embargo la mecánica ondulatoria permite un grado de penetración, como se indica en la Figura.

Sabemos que la frecuencia de las ondas se conserva al pasar de un medio a otro, entonces la ecuación que usamos aquí

$$E_1 = E_2$$

$$\frac{p_1^2}{2m} + V_1 = \frac{p_2^2}{2m} + V_2$$

$$\frac{p_2^2}{2m} = \frac{p_1^2}{2m} + (V_1 - V_2)$$

Si $V_2 \gg V_1 \Rightarrow \frac{p_2^2}{2m} < 0$

$$\Rightarrow p_2 = i\sqrt{-p_1^2 + (V_2 - V_1)2m}$$

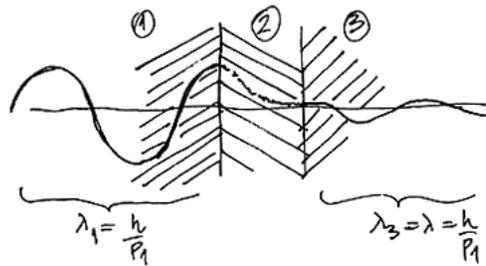
La amplitud de probabilidad decae exponencialmente en la región (2). Si calculamos el vector corriente de probabilidad, \vec{J} , definido anteriormente se comprueba que $\vec{J} = 0$ en la región II.

¿Qué sucede si conectamos la región (2) a otro material que presente el mismo potencial que (1)?

Como se conserva la energía $E_1 = E_2$, $E_2 = E_3$, en cada una de las superficies que separan los tres medios.

La longitud de onda en (3) será igual a aquella de la región (1). Sólo su amplitud habrá disminuido exponencialmente de acuerdo al ancho de la región (2).

$$\lambda_1 = \frac{h}{p_1} \qquad \lambda_3 = \lambda_1 = \frac{h}{p_1}$$



Esto se conoce como el **efecto túnel**. En mecánica cuántica, las partículas pueden atravesar regiones en las cuales la energía cinética es negativa. Esto es imposible en mecánica clásica. Este efecto se observa en innumerables casos en física cuántica. El ejemplo típico es la emisión de una partícula α por parte del átomo de Uranio (U^{238}). Si uno aísla un kilogramo de U , al cabo de $4,5 \times 10^9$ años la mitad (en forma estadística) de los átomos contenidos en el kilogramo inicial habrán emitido una partícula α .

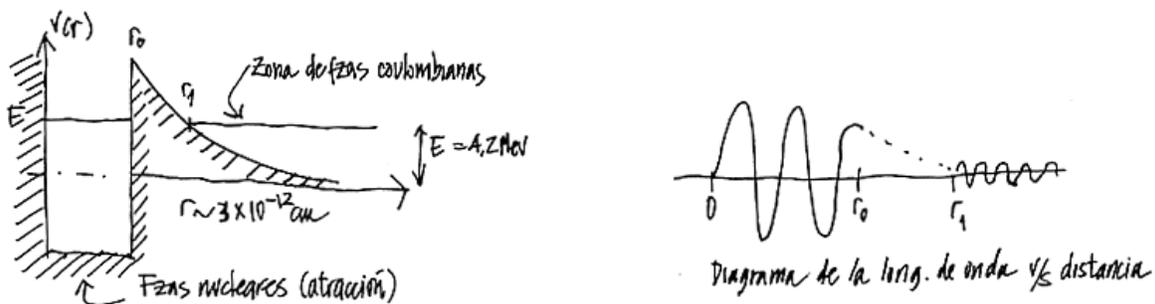


Figura VII.10: El gap de energía entre el nivel de energía de una partícula libre (aquella situada en $x=\infty$) y el nivel de energía más alto al interior del núcleo de Uranio es $E = 4.2 \text{ Mev} = 4,2 \times 10^6 \text{ eV} \sim 7 \times 10^{-6} \text{ ergs}$. Se dibuja la función de onda en forma cualitativa.

El equivalente del efecto túnel en física ondulatoria se observa en el fenómeno denominado reflexión total. Si la luz incide sobre este medio con el ángulo adecuado, sucede lo que se indica a la izquierda de la Figura: la luz resulta reflejada en forma total y viaja a lo largo de la superficie. Si procedemos a disminuir el espesor del medio con índice de reflexión más alto hasta hacerlo muy delgado, podremos notar que parte de la onda comienza a transmitirse a través de la placa. Este es el equivalente del efecto túnel en óptica.

VII.11. Regimen Permanente

A continuación resolveremos la ecuación de Schrödinger en el caso denominado *regimen permanente*. Este ocurre cuando la función de onda no depende explícitamente del tiempo, que corresponde, de acuerdo a la ecuación de Schrödinger, al caso en que la partícula se ubica en un nivel de energía bien determinado. En este caso podemos escribir la función de onda como

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Reemplazando esta factorización en la ecuación de Schrödinger, obtenemos:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

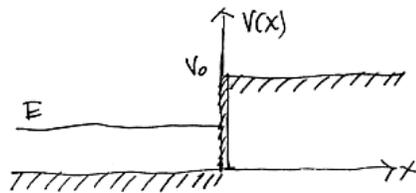
En una dimensión la ecuación de Schrödinger, en regimen permanente es:

$$\left[+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + (E - V)\right]\psi(x) = 0$$

Ejemplo

Resolveremos la ecuación de Schrödinger cuando el potencial representa un salto: un escalón. Este potencial modela un cambio de un medio a otro con características diferentes.

Clásicamente corresponde a una cuerda hecha de dos materiales con distinta densidad.



La energía de la partícula incidente E , será considerada para los casos

- i) $E < V_0$
- ii) $E > V_0$

Comenzaremos por (i) $E < V_0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) = [E - V(x)] \psi_I(x).$$

$$x < 0, \quad V = 0.$$

$$\psi''_I(x) + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{K^2 > 0} \psi_I(x) = 0$$

La solución general es $\psi_I(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}$ $x > 0, \quad V = V_o$

$$\psi''_{II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_o) \psi_{II}(x) = 0,$$

Si definimos: $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_o - E) > 0$, la solución queda:

$$\psi''_{II}(x) = C e^{-qx} + D e^{+qx}$$

Debemos aplicar ahora condiciones de borde para determinar las constantes A, B, C y D.

Empecemos por ψ_{II} , ésta función crece experimentalmente con x , con ello la probabilidad de encontrar la partícula. Como crece sin límite, no tiene una interpretación en base a la probabilidad, no es posible normalizar a la unidad una función con este comportamiento. En consecuencia no tiene significado físico. Debemos eliminar esta función haciendo $D = 0$.

$$\boxed{\text{Condiciones de Borde : } \psi \text{ debe ser finita para todo } x} \Rightarrow D = 0$$

$$\psi_I(x) = A e^{iKx} + B e^{-iKx},$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{-qx}$$

La siguiente condición ocurre al aparecer la discontinuidad del potencial, la segunda derivada de la función de onda ψ , debe ser discontinua ya que, de acuerdo a la ecuación de Schrödinger es proporcional al potencial. Si embargo ψ' y ψ deben ser continuas en la unión de los potenciales.

$$\boxed{\psi(x) \text{ y } \psi'(x) \text{ deben ser } \mathbf{continuas} \text{ al atravesar de un medio a otro}}$$

Nota: Si el potencial salta a “ ∞ ”, solo se exige que $\psi(x)$ sea igual a cero en el punto de discontinuidad.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \Rightarrow iK(A - B) = -qC$$

Vemos que C actúa sólo como un factor de escala, $A/C \equiv a$, $B/C = b$. La solución es:

$$a = \frac{1}{2}(1 + iq/K) \quad b = \frac{1}{2}(1 - iq/K)$$

De esta forma

$$(x < 0) \quad \psi_I(x) = \frac{1}{2}(1 + iq/K)e^{iKx} + \frac{1}{2}(1 - iq/K)e^{-iKx}$$

$$(x > 0) \quad \psi_{II}(x) = e^{-qx}$$

Para facilitar la interpretación de esta solución dividimos por $\frac{1}{2}(1 + iq/K)$. Las soluciones quedan en este caso como:

$$(x < 0) \quad \psi_I(x) = e^{iKx} + \left(\frac{1 - iq/K}{1 + iq/K}\right)e^{-iKx}$$

$$(x > 0) \quad \psi_{II}(x) = \frac{1}{1 + iq/K}e^{-qx}$$

$$K = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \quad q = \sqrt{\frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2}}$$

Recordemos que la amplitud de probabilidad $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, de esta forma el término e^{+iKx} representa una onda viajando hacia la derecha.

Así el primer término de $\psi_I(x)$ representa la onda **incidente** sobre la barrera de potencial. Toda la manipulación que se realizó sobre los coeficientes A , B y C tuvo como objetivo normalizar a la unidad la intensidad de la onda incidente. El coeficiente de reflexión es

$$\frac{1 - iq/K}{1 + iq/K} = 1 \times e^{-i\phi} \quad \text{tg } \phi/2 = q/K$$

El coeficiente de reflexión es igual a la unidad, por lo tanto toda la onda incidente se refleja con un cambio de fase determinado por la razón (q/K) .

Para $x > 0$, la amplitud de probabilidad decae exponencialmente. El vector \vec{J} (flujo de probabilidad) se anula en ambos sectores. A la izquierda existe una superposición de ondas incidente y reflejada, a la derecha ($x > 0$) una onda que se desvanece exponencialmente.

Si $V_o = +\infty$, $q = +\infty$ y la función de onda se hace cero en $x = 0$, la fase de la onda reflejada se anula y la solución queda:

$$(x < 0) \quad \psi_I(x) = e^{iKx} - e^{-iKx} \quad (\psi_I(0) = 0, \text{ conforme a lo indicado anteriormente.})$$

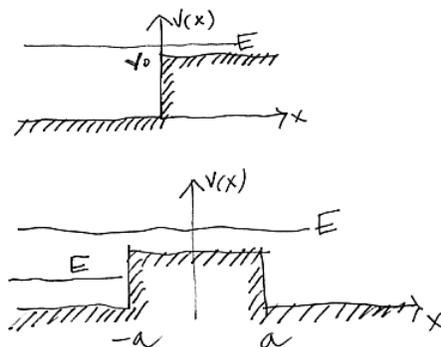
$$(x > 0) \quad \psi_{II}(x) = 0$$

Ejercicios

$$E > V_o$$

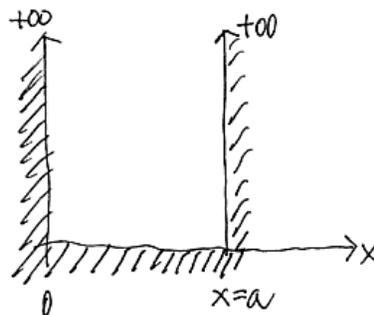
i) $E < V_o \quad x < -a,$

ii) $E > V_o \quad x > a.$



Ejemplo

A continuación estudiaremos el pozo de potencial, que es uno de los potenciales más útiles en el aprendizaje de la mecánica cuántica.



El potencial se caracteriza por:

$$V(x) = 0 \quad 0 < x < a$$

$$V(x) = +\infty \quad x > a$$

La ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (E - v) \psi(x)$$

Para $a > x > 0$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \psi(x) = A \operatorname{sen} kx + B \operatorname{cos} kx$$

Las condiciones de Borde son: $\psi(0) = \psi(a) = 0$. $\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$. Análogamente $\psi(a) = 0 \Rightarrow \operatorname{sen} ka = 0$, $ka = n\pi$, con $n = 1, 2, 3, \dots$

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad \Rightarrow \quad \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2}.$$

$$E = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2 2m}$$

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2}{a^2} \right) n^2$$

Analícemos la función de onda:

$$\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right)$$

Para determinar A_n debemos **normalizar** la solución: imponer la condición que la probabilidad de encontrar la partícula al interior del pozo de potencial debe ser la unidad. (Es claro puesto que la partícula no puede escapar de allí, no puede atravesar las murallas de altura infinita. Debe estar en algún lugar entre 0 y a .)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x) dx = +1.$$

La probabilidad de encontrar la partícula entre $x = 0$ y $x = a$ es igual a la unidad. La partícula **debe** estar allí, puesto que no puede atravesar las murallas de altura infinita.

$$\int_0^a \psi^* \psi dx = \int_0^a A_n^2 \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1 \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{a}},$$

La función de onda normalizada resulta ser:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

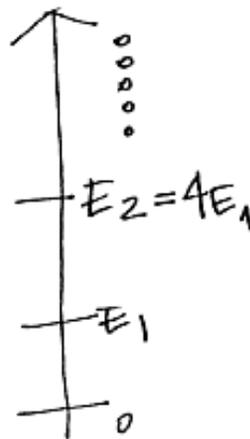
Recordemos que la ecuación de Schrödinger es del tipo Sturm-Liouville y por lo tanto las soluciones de dicha ecuación forman un conjunto completo.

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_m dx = 0$$

Otra cosa interesante es el comportamiento de los niveles de energía.

Es notable que la energía más baja a la cual se puede ubicar la partícula **no** es cero como en mecánica clásica, $n = 0 \Rightarrow \psi = 0$ para $0 < x < a$, esto indicaría que **no** hay una partícula lo cual contradice nuestro punto de partida. Por lo tanto si hay una partícula y ésta se ubica en el nivel más bajo de energía éste es

$$E_1 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \times \frac{\pi^2}{a^2}\right).$$



Esta es una consecuencia del principio de incertidumbre. Veamos: $\Delta x \sim a$, puesto que la partícula está en el pozo de potencial. Ahora $\Delta p \sim 2p$; puesto que la partícula rebota en ambas paredes. Esto es fácil de entender si re-escribimos la solución con exponenciales

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{a}x\right) = \sqrt{\frac{1}{2a}} \times \frac{1}{i} \times [e^{i(\frac{\pi}{a})x} - e^{-i(\frac{\pi}{a})x}]$$

Si recordamos que $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, vemos que cada uno de estos términos corresponde a ondas que viajan en ambos sentidos del eje x . El principio de incertidumbre obliga la siguiente relación

$$a \cdot (2p) \geq h \Rightarrow p = \frac{\pi}{a} \hbar \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{\pi \hbar}{a \hbar} = \frac{\pi}{a}$$

Este es el valor mínimo de k . Si $E_1 = 0$ entonces $p = 0 \Rightarrow \Delta x = \infty$ lo cual contradice las características del pozo de potencial estudiado. El mismo resultado se obtiene en cualquier potencial que se haga infinito en ambos extremos.

Amodo de ilustración dibujamos la función de onda y la probabilidad para los 3 primeros modos.

Ejemplo

- a.- Utilizando la relación de Broglie $P = \frac{h}{\lambda}$ y determinando el valor de p a través de las distintas longitudes de onda λ que caben en el pozo de potencial infinito, encuentre la cuantización de la energía en un pozo de potencial de paredes infinitas.
- b.- Con la expresión anterior y sabiendo que la emisión de energía de un átomo de hidrógeno al caer de $n = 2$ al nivel fundamental $n = 1$ tiene una longitud de onda $\lambda = 1216 \text{ \AA}$, encuentre una estimación para el tamaño del átomo de hidrógeno. Debemos señalar que esta solución funciona en forma exacta sólo para el pozo de potencial con paredes infinitas. En otros casos, por ejemplo, si las paredes son finitas, puede ser una buena aproximación solamente.

La longitud de onda que incrustamos en el potencial debe anularse en los extremos, debido a que el potencial es infinito para $|x| \geq \frac{a}{2}$. Se debe cumplir entonces que

$$n \frac{\lambda}{2} = a, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

De acuerdo a la figura

$$\lambda = \frac{2a}{n} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Utilizando el principio de Broglie, obtenemos un valor para el momentum $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{2a}$ con $n = 1, 2, 3 \dots$

Como el potencial es nulo, la energía es puramente cinética

$$E_n = \frac{p^2}{2m} + v = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{m a^2}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m a^2}.$$

La longitud de onda emitida por el átomo es conocida como la emisión Lyman. La diferencia de energía es:

$$E_2 - E_1 = \frac{\pi \hbar}{2 m a^2} (2^2 - 1^2) = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} = \hbar \omega$$

$$\omega_{\text{Lyman}} = \frac{2\pi c}{\lambda_{\text{Lyman}}} = \frac{6,28 \times 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}}{1216 \times 10^{-18} \text{ cm}}$$

$$\omega_{\text{Lyman}} \simeq 1,6 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$$

$$a^2 = \frac{3\pi^2 \hbar}{2 m_e \omega_{\text{Lyman}}} \simeq \frac{30 \cdot 1,1 \times 10^{-27}}{2 \times 9,1 \times 10^{-28} \times 1,6 \times 10^{18}}$$

Este valor es muy cercano al obtenido en el modelo de Bohr, donde $r_0 = 0,5A^\circ$ y r_0 corresponde al radio del electrón en el primer nivel de energía ($n = 1$).

Ejemplo

Analicemos el problema anterior pero ahora incluimos el tamaño del núcleo atómico: $r = 10^{-12} \text{ cm}$, y nos preguntamos acerca de la energía dle nucleón en el primer nivel de energía. La idea es tener una noción del valor del potencial del núcleo de un átomo. Como estamos usando el potencial de paredes infinitas, la energía para extraer un nucleón es infinita. Sabemos que no es así y que si consideramos este potencial como una primera aproximación al potencial real, que sería un pzo de potencial con altura finita en sus paredes, podemos tener una idea de la energía de los estados ligados en el núcleo.

Solución:

Usando la expresión para la energía:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_h a^2} \sim \frac{10 \times 10^{-68} [\text{Joule} - \text{s}]^2}{2 \times 1,7 \times 10^{-27} \times 10^{28} [\text{kg} - \text{m}^2]}$$

$$E_1 \sim 3 \times 10^{-13} \text{ Joule}$$

Expresando esta energía en electrón - volts

$$E_1 \sim 3 \times 10^{-3} \frac{[\text{Joule}] \times 1 e V}{1,6 \times 10^{-19} \text{ Joule}} \sim 2 \times 10^6 e V$$

$$E_1 \sim 2 M e V, \quad (1 M e V = 10^6 e V).$$

De modo que el pozo de potencial de un núcleo debe ser del orden de $10 M e V$

Ejemplo

Uno de los modelos precursores del núcleo atómico consideraba la presencia de protones y electrones. Uno de los problemas que planteaba este modelo era como retener los electrones en una región del tamaño del núcleo.

a.- A continuación se pide evaluar esta energía

b.- Si consideramos, clásicamente la energía eléctrica debida a la interacción entre los protones y electrones, verificar si esta atracción logra mantener los electrones en el núcleo atómico.

Solución:

a.- Utilizando la expresión para la energía en el potencial de paredes infinitas, tenemos

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_e a^2} \sim 5 \times 10^{-10} [\text{Joule}]$$

$$E_1 \sim 5 \times 10^{-10} [\text{Joule}] \times \frac{1 e V}{1,6 \times 10^{-19} [\text{Joule}]}$$

$$E_1 \sim 3 \times 10^9 M e V.$$

Ciertamente este valor es mucho mayor que la estimación hecha para el núcleo atómico considerado como un pozo finito de potencial ($\sim 10 M e V$).

Surge otro problema: la energía cinética de este electrón es muchísimo mayor que la masa en reposo

$$E^2 = p^2 c^2 + (m_e c^2)^2,$$

pero $m_e c^2 \simeq 0,5 M e V$

de este modo $E \gg m_e c^2$.

Usemos una aproximación relativista para paroblema. como $E \gg m_e c^2$, entonces la mayor parte de la energía se deposita en el término $p c$.

Tomamos entonces

$$E \sim pc = \frac{ch}{\lambda} = \frac{chn}{2a} = \frac{\pi c \hbar}{a}$$

Evaluando la energía

$$E \sim \frac{9 \times 10^8 \times 10^{-34} [\text{Joule} \cdot m]}{10^{-14} [m]}$$

$$E \sim 9 \times 10^{-12} [\text{Joule}] \times \frac{[1 eV]}{1,6 \times 10^{-19} [\text{Joule}]}$$

$$E \sim 6 \times 10^7 eV \sim 60 MeV$$

El valor de la energía cinética del electrón sigue siendo alto con respecto a la estimación de la profundidad del pozo de potencial del núcleo. Sin embargo es un orden de magnitud más pequeña que la estimación anterior.

analicemos ahora el efecto del potencial electrostático entre protones y un electrón.

$$V_{\text{eléctrico}} = -\frac{50 e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \quad (MKS)$$

Si tomamos $r \equiv$ radio estimado del núcleo, tenemos:

$$V_{\text{eléctrico}} = -\frac{50 \times 9 \times 10^9 \times [1,6 \times 10^{-19}]^2}{10^{-14}} [\text{Joule}],$$

$$V_{\text{eléctrico}} \sim -5 \times 10^{-13} [\text{Joule}],$$

$$V_{\text{eléctrico}} \sim -\frac{1,3 \times 10^{-12}}{1,6 \times 10^{-19}} [eV] \sim -10 MeV$$

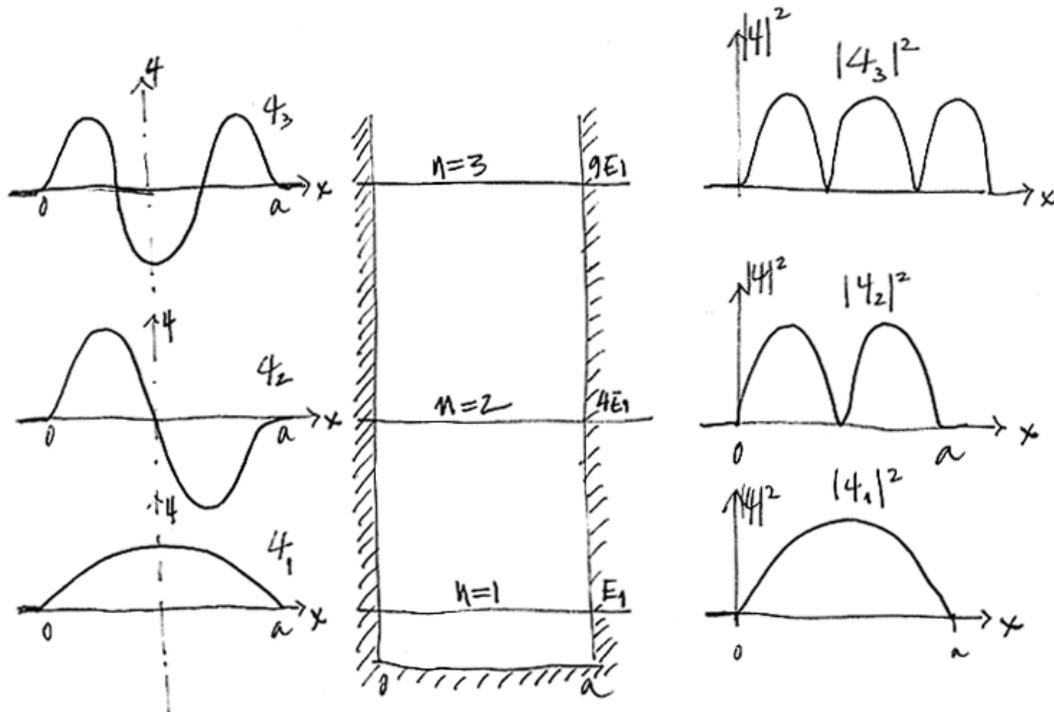
$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8,988 \times 10^9 \frac{[N \cdot m^2]}{[C^2]}$$

La energía del ligazón proveniente de la interacción electrostática es un orden de magnitud menor que la energía cinética.

De esta forma, si el pozo de potencial del núcleo es del orden de los $10 MeV$ y la energía cinética del electrón es 10 veces mayor, parece poco probable (dadas las aproximaciones, no

podemos ser más categóricos) que el electrón sea retenido en un espacio tan pequeño como el núcleo.

Vimos en este último cálculo, que la atracción electrostática también está un orden de magnitud más débil.



Ejemplo

Consideremos una partícula en un pozo de potencial infinito que sabemos (de alguna forma) que se encuentra en una superposición de dos estados asociados a las energías E_1 y $E_2 = 2^2 E_1$. Demuestre que el valor medio del momentum es igual a la definición clásica del momentum de esta partícula si consideramos la velocidad como la velocidad media $\langle v \rangle$.

La función de onda de la partícula queda especificada por:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left(\cos \frac{\pi x}{a} \cdot e^{-i E_1 t / \hbar} + \text{sen} \frac{2 \pi x}{a} e^{-i 4 E_1 t / \hbar} \right)$$

Podemos reconocer el estado como una superposición de dos estados de energía inferior

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_2)$$

Calculemos $\langle x \rangle$ y $\langle p \rangle$.

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx \\ &= \int_{-a/2}^{a/2} \frac{x}{a} \left[\cos^2 \frac{\pi x}{a} + \cos \frac{\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{2\pi x}{a} (e^{i3E_1 t/\hbar} + e^{-i3E_1 t/\hbar}) \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{sen}^2 \frac{2\pi x}{a} \right] dx \end{aligned}$$

El primer y último término del integrando se anulan por ser funciones impar al estar multiplicados por x entre $-a/2$ hasta $a/2$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \langle x \rangle &= \frac{1}{a} (e^{3iE_1 t/\hbar} + e^{-3iE_1 t/\hbar}) \int_{-a/2}^{a/2} x \cos \frac{\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{2\pi x}{a} dx \\ \langle x \rangle &= \frac{2}{a} \cos \frac{3E_1 t}{\hbar} \cdot \left(\frac{8a^2}{9\pi^2} \right) = \frac{16a}{9\pi^2} \cos \frac{3E_1 t}{\hbar} \end{aligned}$$

El resultado, describe la dependencia temporal del valor esperado para la posición. Dicho valor oscila con amplitud $\frac{16a}{9\pi^2}$ y frecuencia angular $\frac{3E_1}{\hbar}$

Definimos el operador momentum como, $P \equiv mV$, de modo que $\langle P \rangle \equiv m \langle V \rangle$.

$$\begin{aligned} \langle P \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi dx \\ &= \int_{-a/2}^{a/2} \left[\frac{\hbar}{ia} (\cos \frac{\pi x}{a} e^{iE_1 t/\hbar} + \operatorname{sen} \frac{2\pi x}{a} e^{i4E_1 t/\hbar}) \right] \\ &\quad \times \left[-\frac{\pi}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} e^{-iE_1 t/\hbar} + \frac{2\pi}{a} \cos \frac{2\pi x}{a} e^{-i4E_1 t/\hbar} \right] dx \\ &= -\frac{\hbar\pi}{ia^2} \left(e^{i3E_1 t/\hbar} \int_{-a/2}^{a/2} \operatorname{sen} \frac{2\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} dx \right) \\ &\quad - 2 \left(e^{-i3E_1 t/\hbar} \int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \cos \frac{2\pi x}{a} dx \right) \\ \langle P \rangle &= -\frac{\hbar\pi}{ia^2} \left[e^{i3E_1 t/\hbar} \cdot \left(\frac{4a}{3\pi} \right) - 2 e^{-i3E_1 t/\hbar} \cdot \left(\frac{2a}{3\pi} \right) \right] \\ \langle P \rangle &= -\frac{\hbar\pi}{ia^2} \frac{4a}{3\pi} 2i \operatorname{sen} \left(\frac{3E_1 t}{\hbar} \right) = -\frac{8\hbar}{3a} \operatorname{sen} \left(\frac{3E_1 t}{\hbar} \right). \end{aligned}$$

Finalmente podemos comprobar que las dependencias temporales encontradas para $\langle x \rangle$ y $\langle P \rangle$ son las adecuadas y se cumple que la derivada del valor medio de la posición corresponde al valor medio del momentum.

$$\begin{aligned} m \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= m \frac{16a}{9\pi^2} \left(-\frac{3E_1}{\hbar} \right) \text{sen} \frac{3E_1}{\hbar} \text{sen} \frac{3E_1 t}{\hbar} \\ &= \frac{-16ma}{3\pi^2 \hbar} \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \text{sen} \frac{3E_1 t}{\hbar} = \frac{-8\hbar}{3a} \text{sen} \frac{3E_1 t}{\hbar} \\ \Rightarrow \quad m \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \langle P \rangle \end{aligned}$$

□

VII.12. Electrones en metales

El pozo de potencial se utiliza para describir aproximadamente el comportamiento de los electrones en un metal y calcular la energía de Fermi.

Los metales simples son aquellos cuyos electrones pueden moverse libremente en la red. Los átomos están relativamente separados y el último electrón orbital (ligado al átomo) se ubica a energías más bajas que el nivel del electrón de conducción. (Ch. Kittel Introducción a la Física del Sólido).

Ciertamente existe una influencia de la red cristalina en el movimiento de los electrones. De hecho algunos metales exhiben bandas de energía que son prohibidas: no existen electrones en el metal que tengan dichas energías. La teoría del electrón libre no puede explicar este comportamiento, es necesario recurrir a la influencia de la red cristalina sobre el electrón. Las energías que no están permitidas son aquellas cuya longitud de onda responde a la relación de Bragg.

Metales simples: electrón libre

Calcularemos la cantidad denominada **energía de Fermi** de los electrones en un metal. Al final de este cálculo daremos una definición de esta cantidad.

Supongamos un potencial en 3-dimensiones. La ecuación de Schödinger para este caso es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}) + v\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

$V = 0$ en el interior del cubo

Donde:

$V = \infty$ en el exterior.

La solución se busca por el método de separación de variables que permiten transformar ecuaciones diferenciales a derivadas parciales en ecuaciones diferenciales ordinarias.

$$\psi(\vec{x}) = X(x)Y(y)Z(z).$$

De esta forma, por analogía con el caso anterior de una dimensión, aparecen tres números cuánticos n_x, n_y, n_z .

Ejercicio

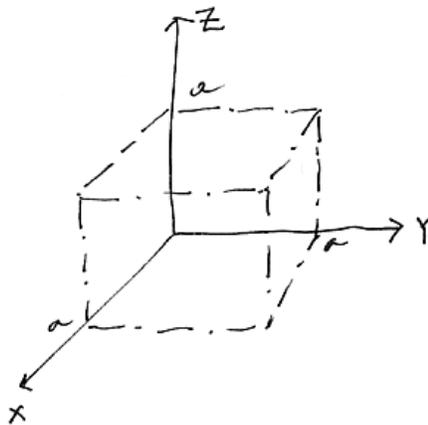
Si el origen del cubo de lado a se ubica en un vértice:

a) Demostrar que la energía en este caso depende de

$$n_x, n_y, n_z (\vec{n}) \text{ como } E_{\vec{n}} = ds \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

b) Demostrar que la función de onda es $\psi(x) = C \sin(n_x \frac{\pi x}{a}) \sin(\frac{n_y \pi y}{a}) \sin(\frac{n_z \pi z}{a})$

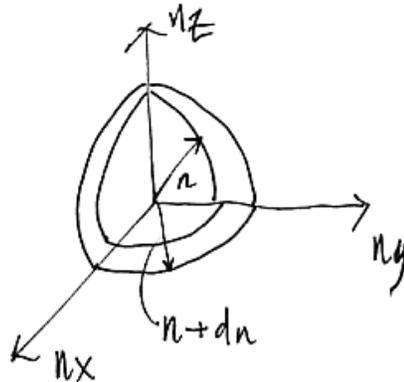
c) Determinar el valor de C normalizando la función de onda en el cubo.



Para calcular la energía de Fermi necesito conocer cuantos niveles de energía existen por intervalo de n , donde $n \equiv |\vec{n}| = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$. Este cálculo es idéntico al que hicimos en el

caso de la radiación de un cuerpo negro.

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (n \equiv |\vec{n}|)$$



Si $n \gg 1$, lo podemos suponer continuo y el vol. entre n y $(n + dn)$ lo identificamos como el número de estados posibles

$$dN(E) = \frac{1}{8} (4\pi n^2 dn)$$

$\frac{1}{8}$ sólo el octante positivo en el espacio \vec{n} . $(4\pi n^2 dn)$ representa el volumen de un cascarón.

Relacionando esto $N(E)$ con $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} n^2$

$$dE = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m} n dn$$

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{4\pi a^3 (2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} \equiv \frac{\# \text{ de niveles existentes}}{\text{unidad de energía}}$$

De aquí podemos calcular el # de electrones por unidad de volumen η que se pueden acomodar en función de la energía.

$$\eta = \int_0^{E_{max}} \frac{g(E)}{v} \cdot dE = \frac{16\pi (2m_e^3)^{1/2}}{3h^3} E_{max}^{3/2}$$

Multiplique $\times 2$ porque los electrones son **Fermiones** y sólo se pueden ubicar dos por nivel de energía

$$E_{max} \equiv E_{\text{de Fermi}}$$

En cada metal existe un número máximo de átomos por unidad de volumen. Esto está determinado por el peso atómico A . De esta forma y sabiendo cuantos electrones aporta cada átomo podemos calcular el valor de η , con ello la energía máxima de un electrón en el metal.

Ejemplo

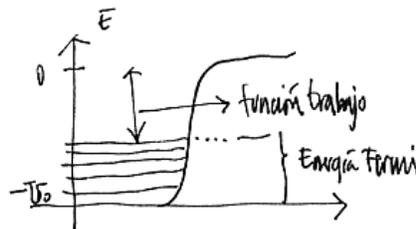
La densidad de Li es $0,534 \text{ gr/cm}^3$ y su peso atómico es 6.94. Sabiendo que el número de Avogadro es $N_o = 6,02 \times 10^{23}$ átomos.

En 6.94 gramos hay $6,02 \times 10^{23}$ electrones (1 por átomo)

$$\eta = \frac{\# \text{ electrones}}{\text{u. de vol.}} = \frac{,534}{6,94} \times 6,02 \times 10^{23} = 4,63 \times 10^{22} e^- / \text{cc.}$$

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{\pi} \eta \right)^{2/3} = 7,55 \times 10^{12} \text{ erg.}$$

$$= 4,7 \text{ ev.}$$



VII.13. Átomos con dos niveles de energía

VII.13.1. Álgebra, bra, ket, unidad

En un átomo real existen reglas de selección que limitan las transiciones de un estado a otro. Los átomos incluso el más simple, el hidrógeno, son sistemas complejos.

Por esta razón necesidad o conveniencia uno considera sistemas elementales que sólo poseen dos niveles que pueden acoplarse mediante una transición.

Representación de los estados en Mecánica Cuántica (Matemáticas). Notación $|\rangle$ y $\langle|$

Tomemos el ejemplo de un sistema con dos estados posibles para ilustrar el problema.

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \langle 1| = [1 \ 0], \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \langle 2| = [0 \ 1].$$

$$|\psi\rangle = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle$$

Cualquier estado se puede expandir en términos de los estados base, dando las amplitudes correspondientes a cada uno.

Si **no** se ha realizado ninguna medición, el sistema se encuentra en una superposición de los estados posibles.

La amplitud de probabilidad correspondiente a un sistema que en el instante inicial se encuentra en el estado $|\phi\rangle$ y posteriormente se encuentra $|\psi\rangle$, queda definida como

$$\begin{aligned} \langle\phi|\psi\rangle &= \sum \langle\phi|i\rangle\langle i|\psi\rangle, \quad \text{donde} \\ |i\rangle\langle i| &= |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| \\ &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} [1 \ 0] + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} [0 \ 1] \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Generalización al caso de un operador con autovalores en los números reales:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int \langle\phi|x\rangle dx \langle x|\psi\rangle$$

Lo que hemos hecho es introducir un uno: $1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle dx \langle x|$. (Es necesario ser más preciso con esta igualdad en espacios de dimensiones infinitas, pero no nos detendremos en analizar esta expresión con más detalle).

$$= \int \phi^*(x) \psi(x) dx$$

la ortonormalidad se expresa como

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad \text{o en dimensiones infinitas } \delta(x-y) = \int_{-\infty}^{+\infty} e(y)^* e(x) dx.$$

$$\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j = \delta_{ij} \quad \vec{A} \cdot \vec{B} = \sum_i (\vec{A} \cdot \hat{e}_i)(\hat{e}_i \cdot \vec{B})$$

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^*$$

$$|\phi\rangle = \sum |i\rangle \langle i | \phi \rangle$$

Dado un operador (que lo podemos imaginar como una matriz actuando sobre un vector o un operador diferencial actuando sobre una función, tenemos

$$\langle \psi | A | \phi \rangle$$

Si expandimos cada uno de estos vectores en los vectores base, tenemos:

$$|\phi\rangle = \sum_i C_i |i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_j D_j |j\rangle$$

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{i,j} D_j^* \langle j | i \rangle C_i = \sum_i D_j^* C_j$$

Como ya lo definimos: $\langle \psi | A | \phi \rangle \equiv$ comenzamos con una partícula en el estado $|\phi\rangle$, la partícula atraviesa una caja negra (o conectamos y desconectamos una interacción representada por el operador A medimos nuevamente el estado de la partícula para verificar la amplitud de probabilidad que se encuentre en el estado $|\psi\rangle$.

$$\langle \psi | A | \phi \rangle = \sum_{i,j} \langle \psi | j \rangle \langle j | A | i \rangle \langle i | \phi \rangle$$

factorizando $\langle \psi |$ en ambos lados de la ecuación, tenemos

$$A | \phi \rangle = \sum_{i,j} |j\rangle \underbrace{\langle j | A | i \rangle}_{\#} \underbrace{\langle i | \phi \rangle}_{\#} = \sum b_j |j\rangle$$

$|i\rangle$: base de un estado por el ejemplo el spin, el nivel de energía de oscilador...

Cada uno de los estados puede rotarse y cambiar de representación. Existen, en general, muchas representaciones para una base de un estado.

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |i\rangle$$

Los coeficientes C_i dependen de las condiciones físicas que rodean al experimento. Diferentes condiciones producen conjuntos distintos de coeficientes C_i .

Por ejemplo, una partícula con spin y momentum la representación (abstracta) es

$$|\psi\rangle \equiv |p, s\rangle$$

Estos son modelos que pueden ser malos o aproximados. Si una partícula, por ejemplo el protón tiene o no estados internos y si es relevante incluir dichos estados en la base ... No se sabe.

En determinadas circunstancias un átomo de plata en un campo magnético por ejemplo, es razonable eliminar los grados internos de libertad del sistema porque la energía aplicada no es capaz de modificarlos

VII.14. Evolución de los estados

$\langle\psi|U(t_2, t_1)|\phi\rangle$ = amplitud de probabilidad para esta en $|\phi\rangle$ en t_1 y posteriormente en $|\psi\rangle$ en t_2

$$\langle\psi|U(t_2, t_1)|\phi\rangle = \sum_{i,j} \langle\psi|j\rangle \langle j|U(t_2, t_1)|i\rangle \langle i|\phi\rangle$$

El bloque fundamental es $\langle j|U(t_2, t_1)|i\rangle$

Dos casos

$$1.- \quad t_2 = t_1 + \Delta t$$

$$2.- \quad t_1 = -\infty, t_2 = +\infty$$

En el primer caso buscamos la evolución de un estado, digamos $|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t + \Delta t)\rangle$

En el segundo caso la matriz $\langle j|U|i\rangle$ se denomina matriz de Scattering S_{ji} y relaciona el estado final con el inicial cuando ambos no están a una interacción.

Proposición

$$U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2)U(t_2, t_1)$$

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = U(t + \Delta t, t)|\psi(t)\rangle$$

$$\langle i|\psi(t + \Delta t)\rangle = \langle i|U(t + \Delta t, t)|\psi(t)\rangle$$

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j \langle i|U(t + \Delta t, t)|j\rangle \underbrace{\langle j|\psi(t)\rangle}_{C_j(t)}$$

$$U_{ij}^{(t+\Delta t)} \langle i|U(t + \Delta t, t)|j\rangle$$

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j U_{ij}(t + \Delta t, t) C_j(t)$$

$$U_{ij} = \delta_{ij} + \frac{i H_{ij}}{\hbar} \Delta t$$

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

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j (\delta_{ij} + (-i) \frac{H_{ij}}{\hbar} \Delta t) C_j(t)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_j H_{ij}(t) C_j(t)$$

$$i \hbar \frac{dC_i(t)}{dt} = \sum_j H_{ij}(t) \cdot C_j(t)$$

$H_{ij} \equiv$ Componentes de la matriz que representa al Hamiltoniano

$$H_{ij}^* = H_{ji}$$

$$\begin{cases} i \hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11} C_1 + H_{12} C_2 \\ i \hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{22} C_2 + H_{21} C_1 \end{cases}$$

Ejemplo

Estudiaremos la molécula de amonio. El átomo de Nitrógeno tiene dos posiciones relativas posibles con respecto al triángulo formado por los átomos de Hidrógeno. Ambas posiciones son simétricas, de manera que tienen la misma energía que denominamos E en el hamiltoniano.

$$\text{Simetría de la molécula, } \Rightarrow H_{11} = H_{22} \equiv E_0.$$

Si $H_{21} = H_{12} = 0$, entonces no existe interacción entre el sistema y el exterior. Como sabemos que por efecto túnel la partícula puede pasar de un lado a otro del plano de los hidrógenos, modelamos esta conducta mediante una perturbación externa. Introducimos, en este caso las componentes fuera de la diagonal, que deben ser iguales (si son reales) $H_{12} = H_{21} = -A \neq 0$. No identificamos el origen de A . Lo haremos más adelante.

Las ecuaciones que describen la dinámica del sistema bajo estas condiciones son:

$$i \hbar \frac{dC_1}{dt} = E C_1 - A C_2 \quad (\text{VII.7})$$

$$i \hbar \frac{dC_2}{dt} = E C_2 - A C_1 \quad (\text{VII.8})$$

La solución de este sistema de ecuaciones es

$$C_1 + C_2 = a e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0-A)t}$$

$$C_1 - C_2 = b e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+A)t}$$

$$C_1(t) = \frac{a}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0-A)t} + \frac{b}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+A)t}$$

$$C_2(t) = \frac{a}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0-A)t} - \frac{b}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+A)t}$$

Existen dos niveles de energía

$$b = 0 \quad \hbar\omega = E_0 - A$$

$$a = 0 \quad \hbar\omega = E_0 + A$$

Ejercicio: si en $t = 0$ la molécula está en el nivel 1, $|1\rangle$

¿Cuál es la probabilidad que se encuentre en el nivel $|2\rangle$ en el instante t ?

$$C_1(0) = 1 = \frac{a+b}{2}$$

$$C_2(0) = 0 = \frac{a-b}{2}$$

Luego $a = b = 1$

$$C_1(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \left(\frac{e^{\frac{i}{\hbar} A t} + e^{-\frac{i}{\hbar} A t}}{2} \right)$$

$$C_2(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \left(\frac{e^{\frac{i}{\hbar} A t} - e^{-\frac{i}{\hbar} A t}}{2} \right)$$

$$C_1(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \cos\left(\frac{A}{\hbar} t\right)$$

$$C_2(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \operatorname{sen}\left(\frac{A}{\hbar} t\right)$$

La probabilidad de encontrarlo en el estado $|1\rangle$ es

$$|C_1(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{A}{\hbar} t\right)$$

VII.14.1. Cambio de Base

Tal como en álgebra lineal, podemos hacer un cambio de base para que el hamiltoniano sea ahora diagonal. Esta es otra representación del operador H .

Se incluyen los detalles del cambio de base a continuación.

$$|\psi\rangle = |1\rangle\langle 1|\psi\rangle + |2\rangle\langle 2|\psi\rangle$$

$$= |1\rangle C_1(t) + |2\rangle C_2(t)$$

$$\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar} H|\psi\rangle$$

$$i\hbar\dot{C}_1|1\rangle + i\hbar\dot{C}_2|2\rangle = C_1(t)H|1\rangle + C_2(t)H|2\rangle.$$

Definiendo $\langle i|H|j\rangle \equiv H_{ij}$ y como C_1 y C_2 son funciones del tiempo, aplicamos el ket correspondiente a estas ecuaciones y obtenemos:

$$\langle 1| : \quad i\hbar\dot{C}_1 = H_{11}C_1(t) + H_{21}C_2(t),$$

$$\langle 2| : \quad i\hbar\dot{C}_2 = H_{12}C_1(t) + H_{22}C_2(t).$$

$$H_{11} = H_{22} = E, \quad H_{12} = H_{21} = -A$$

$$\text{sumando} \rightarrow i\hbar(C_1 + C_2) = (E_0 - A)(C_1 + C_2), \quad C_1 + C_2 = a e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 - A)t}$$

$$\text{restando} \rightarrow C_1 - C_2 = b e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + A)t}$$

$$C_1(t) = \frac{a}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 - A)t} + \frac{b}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + A)t}$$

$$C_2(t) = \frac{a}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 - A)t} - \frac{b}{2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + A)t}$$

$(C_1 + C_2)$ tienen un autovalor con una sola energía $(E_0 - A)$. Análogamente a $C_1 - C_2$ le corresponde la energía $(E_0 + A)$.

Definamos modos (o nuevos vectores base) que son autovalores del hamiltoniano.

$$C_{II} = C_1 + C_2 = \langle 1|\psi\rangle + \langle 2|\psi\rangle$$

$$C_{II} = \langle II|\psi\rangle$$

$$|II\rangle = |1\rangle + |2\rangle$$

$$\langle 1|II\rangle = \langle 1|1\rangle + \langle 1|2\rangle = 1$$

$$\langle 2|II\rangle = 1$$

$$\langle II|II\rangle = \langle II|(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|)|II\rangle$$

$$= 2$$

Debemos redefinir $|II\rangle$ para que cumpla con la condición de todo vector base, tener módulo unidad.

$$\begin{aligned}
C_{II} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_1 + C_2) \\
\langle II|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 1|\psi\rangle + \langle 2|\psi\rangle) \\
|II\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle) \\
|\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle) \\
\langle I|I\rangle &= \frac{1}{2} (\langle 1| - \langle 2|) (|1\rangle - |2\rangle) \\
&= \frac{1}{2} (1 + 1) = 1 \\
\langle I|II\rangle &= \frac{1}{2} (\langle 1| - \langle 2|) (|1\rangle + |2\rangle) \\
&= \frac{1}{2} (1 - 1) = 0
\end{aligned}$$

y ahora las ecuaciones de evolución del estado $|\psi\rangle$ de la partícula en el tiempo son:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dC_I}{dt} &= (E_0 - A)C_I = E_I C_I \\
i\hbar \frac{dC_{II}}{dt} &= (E_0 + A)C_{II} = E_{II} C_{II}
\end{aligned}$$

De acuerdo a estos resultados, el hamiltoniano en esta nueva base está diagonalizado:

$$H_{I,I} = E_I, H_{I,II} = 0 = H_{II,I}, H_{II,II} = E_{II}$$

ψ_I, ψ_{II} son los dos estados estacionarios correspondientes a este sistema

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} &= H|\psi\rangle \\
\langle I|(i\hbar) \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I\rangle &= H|\psi_I\rangle = E_I |\psi_I\rangle \\
|\psi_I\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_I t} |I\rangle
\end{aligned}$$

Análogamente:

$$|\psi_2\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_{II} t} |II\rangle$$

Las bases $|I\rangle$ e $|II\rangle$ son independientes del tiempo

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2 \\
|\psi\rangle &= |I\rangle C_I + |II\rangle C_{II} \\
C_I &= \langle I|\psi_I\rangle, \quad C_{II} = \langle II|\psi_{II}\rangle
\end{aligned}$$

VII.15. Partículas con Spin 1/2. Interacciones con un Campo Magnético

VII.15.1. Revisión de los Paréntesis de Poisson

$$[q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [q_i, P_j] = i \hbar \delta_{ij} \quad (\text{VII.9})$$

veamos como opera $p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}$ en la representación de coordenadas:

$$\begin{aligned}
[q_i, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}] \psi(q, t) &= \frac{\hbar}{i} q_\ell \frac{\partial}{\partial q_j} \psi - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} (q_\ell \psi) \\
&= \frac{\hbar}{i} q_\ell (\frac{\partial}{\partial q_j} \psi) - \frac{\hbar}{i} \delta_{\ell j} \psi - \frac{\hbar}{i} q_\ell \frac{\partial}{\partial q_j} \psi \\
&= -\frac{\hbar}{i} \delta_{\ell j} \psi = i \hbar \delta_{\ell j} \psi \\
\Rightarrow [q_\ell, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}] &\equiv i \hbar \delta_{\ell j}
\end{aligned}$$

En general, si, localmente, el operador se puede expandir en serie de potencias

$$[q_\ell, F(q_1, \dots, q_1)] = 0, \quad [p_\ell, F(q_1, \dots, q_r)] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial q_\ell}. \quad (\text{VII.10})$$

Se puede trabajar en la representación de momento. Allí, por definición el operador momentum toma la forma $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$. De la misma forma como definimos el operador posición en el espacio de coordenadas.

Supondremos que el operador posición en esta representación toma la forma

$$q_\ell = \alpha \frac{\partial}{\partial p_\ell}. \quad (\text{VII.11})$$

Usando las propiedades descritas anteriormente podemos examinar cómo se resuelve un conmutador entre esta definición del operador posición y el operador momentum:

$$\left[\alpha \frac{\partial}{\partial p_\ell}, p_k\right]\psi(p) = \alpha \delta_{\ell k} \psi + \alpha p_k \frac{\partial \psi}{\partial p_\ell} - \alpha p_k \frac{\partial}{\partial p_\ell} \psi \quad (\text{VII.12})$$

Luego, $\alpha = i\hbar$ y $q_\ell = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_\ell}$: esta es la representación del operador posición en la representación de momentum.

Ejercicio

Evaluaremos el siguiente conmutador:

$$\begin{aligned} [A, B^n] &= [A, B B^{n-1}] = [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-1}] \\ &= \dots = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B]B^{n-s-1} \end{aligned}$$

Aplicado al operador posición y funciones del operador momentum, tenemos:

$$\begin{aligned} [q, p^n] &= n i \hbar p^{n-1} \\ - [q, p^n] &= \sum_{s=0}^{n-1} p^s [q, p] B^{n-s-1} \\ &= i \hbar \sum_{s=0}^{n-1} p^s p^{n-s-1} = i \hbar \sum_{s=0}^{n-1} p^{n-1} = i \hbar n p^{n-1} \end{aligned}$$

Ejemplo

Estudiaremos el conmutador de los operadores de momentum angular. Estos son operadores diferenciales, actúan sobre el espacio de funciones.

Lo que pretendemos ilustrar es que el operador spin tiene las mismas relaciones de conmutación, pero actúa sobre un espacio vectorial y por tanto tiene una representación matricial. Esta analogía nos permite imaginar el spin como una rotación intrínseca de la partícula. pero estas son analogías solamente. Lo importante son las relaciones de conmutación.

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [y p_z - z p_y, z p_x - x p_z] \\ &= [y p_z, z p_x - x p_z] - [z p_y, z p_x - x p_z] \\ &= [y p_z, z p_x] + [z p_y, x p_z] = y [p_z, z] p_x - x [z, p_z] p_y \\ &= i \hbar [-y p_x + x p_y] = i \hbar L_z \end{aligned}$$

Si lo consideramos como un operador diferencial actuando sobre la función de onda, tenemos

$$[L_x, L_y]\psi(\vec{x}) =$$

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad L_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

El producto de estos operadores es

$$(L_x L_y) \psi(x) = \frac{\hbar^2}{(-1)} (y \partial_z - z \partial_y)(z \partial_x - x \partial_y) \psi(x)$$

$$y \partial_z (z \partial_x \psi(\vec{x})) = y \partial_x \psi(x) + y z \partial_z \partial_x \psi(x)$$

Desarrollando se obtiene el mismo resultado anterior.

□

Veamos ahora la representación del operador spin 1/2.

Definimos las matrices de 2×2 cuyas componentes las indicaremos más adelante pero que tienen la misma álgebra que el momento angular analizado previamente.

$$[\sigma_x, \sigma_y] = i \sigma_z$$

las matrices que representan al spin son proporcionales a las de pauli y por tanto tienen la misma álgebra.

$$s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$[s_x, s_y] = \frac{\hbar}{2} s_z$$

Las matrices de spin 1/2 son s_x , s_y y s_z , definidas como $s_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$.

VII.15.2. Nueva revisión del sistema con dos niveles de energía

El sistema descrito sólo con dos niveles de energía accesible es fácil de resolver.

Hemos resuelto, al comienzo, el caso de un sistema de dos dimensiones. Posteriormente hicimos un cambio de base para dejarlo diagonal. Comenzaremos acá, nuevamente con el caso de dos dimensiones y lo resolveremos en general, dada su simplicidad. Posteriormente usaremos estas fórmulas para resolver la interacción con un campo magnético.

Expresión general de un Hamiltoniano independiente del tiempo.

Supongamos que la representación del hamiltoniano escrita en forma matricial H_{ij} , no depende del tiempo. Además, se debe cumplir que $H_{12} = H_{21}^*$.

Si el sistema está inicialmente en su estado propio (diagonal) que definimos como $|I \rangle$ y $|II \rangle$, entonces la evolución en el tiempo de este estado está dada por:

$$|\psi_I \rangle = |I \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_I t} \quad |\psi_{II} \rangle = |II \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_{II} t}$$

Los autovalores son

$$E_I = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} + \sqrt{\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}},$$

$$E_{II} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} - \sqrt{\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}}.$$

estos son los valores de las energías propias en función del hamiltoniano inicial descrito por los estados $|1 \rangle$ y $|2 \rangle$.

La combinación de estos estado que conduce a los estados propios está definida como

$$|I \rangle = a_1|1 \rangle + a_2|2 \rangle, \quad |II \rangle = a'_1|1 \rangle + a'_2|2 \rangle$$

$$\langle I|I \rangle = 1 \Rightarrow |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_I - H_{11}}$$

Análogamente $|a'_1|^2 + |a'_2|^2 = 1$

$$\frac{a'_1}{a'_2} = \frac{H_{12}}{E_{II} - H_{22}}$$

Estas entonces son las expresiones generales. Un caso que ya hemos trabajado es: $H_{11} = E_0 = H_{22}$ y $H_{21} = H_{12} = -A$.

Usando estos valores y reemplazándolos en las ecuaciones anteriores tenemos:

$$E_I = E_0 + A$$

$$E_{II} = E_0 - A$$

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle)$$

$$|II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |2\rangle)$$

Verifique este resultado.

Ejemplo

Estudiaremos la interacción de un campo magnético constante B_0 con el momento magnético del electrón que definimos con la letra μ . (Investigue cuál es la expresión de esta cantidad en función de las propiedades del electrón.)

La interacción tiene dos energías posibles

$$+\mu B_z, \quad \text{y} \quad -\mu B_z$$

Asociaremos el primer nivel de energía con el estado $|2\rangle$ y el segundo (negativo) con $|1\rangle$.

El estado inicial es una superposición de ambos estados iniciales, los correspondientes autovalores del hamiltoniano inicial. Las constantes C_1 y C_2 dependen del tiempo.

$$|\psi\rangle = C_1|1\rangle + C_2|2\rangle$$

las ecuaciones de movimiento:

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = E_1 C_1 = -\mu B_z C_1$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = E_2 C_2 = \mu B_z C_2$$

$$H_{11} = -\mu B_z \quad H_{12} = H_{21} = 0 \quad H_{22} = \mu B_z$$

Si ahora consideramos un campo magnético en una dirección arbitraria, tenemos

$$E_I = -\mu \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$$

$$E_{II} = +\mu \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$$

Debemos adaptar estas nuevas variables a la expresión de nuestro hamiltoniano

$$\begin{aligned}
 H_{11} &= -\mu B_z \\
 H_{22} &= \mu B_z \quad H_{12} H_{21} = H_{12}(H_{12})^* = |H_{12}|^2 \\
 \left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + |H_{12}|^2 &= \mu^2(B_x^2 + B_y^2 + B_z^2)
 \end{aligned}$$

la solución de estas ecuaciones es la siguiente:

$$\begin{aligned}
 H_{11} &= -\mu B_z \\
 H_{22} &= \mu B_z \\
 |H_{12}|^2 &= \mu^2(B_x^2 + B_y^2) \\
 H_{12} &= \mu(B_x \pm i B_y)e^{i\phi}, \quad \text{con } \phi \text{ una fase indeterminada} \\
 H_{12} &= -\mu(B_x - i B_y) \quad H_{11} = -\mu B_z \\
 H_{21} &= -\mu(B_x + i B_y) \quad H_{22} = +\mu B_z
 \end{aligned}$$

$$i \hbar \frac{dC_1}{dt} = -\mu[B_z C_1 + (B_x - i B_y)C_2]$$

$$i \hbar \frac{dC_2}{dt} = -\mu[(B_x + i B_y)C_1 - B_z C_2]$$

Nota: Podemos escribir esta interacción de la forma siguiente $-\mu \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$? donde $\vec{\sigma} = [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z]$.

La expresión de las matrices de Pauli son:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$u = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Escribiendo las ecuaciones como vectores columna y matrices, tenemos:

$$i \hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} > = -\mu \sigma_z \cdot B_z \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} > -\mu \sigma_x \cdot B_x \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} > -\mu \sigma_y \cdot B_y \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} >$$

$$= -\mu(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} >$$

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle$$

$$C_1 = \langle \psi | 1 \rangle, \quad C_2 = \langle \psi | 2 \rangle$$

$$C_1 = a_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_I t}, \quad C_2 = a_2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_{II} t}$$

$$C_2 \propto e^{i E_I t / \hbar}, \quad C_1 \propto e^{-i E_I t / \hbar}$$

donde $E_I = -\mu B_z$ el nivel de mínima energía que corresponde cuando están alineados (esto porque tomaremos μ como un valor negativo).

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_I - H_{11}} \quad |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

$$B_z = B \cos \theta, \quad B_x = B \sin \theta \cos \phi, \quad B_y = B \sin \theta \sin \phi$$

$$H_{11} = -\mu B \cos \theta$$

$$H_{12} = -\mu B \sin \theta (\cos \phi - i \sin \phi)$$

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{\sin \theta e^{-i\phi}}{1 - \cos \theta} = \frac{\cos \theta / 2 e^{-i\phi}}{\sin \theta / 2}$$

$$a_1 = \cos \theta / 2 e^{-i\phi/2}, \quad a_2 = \sin \theta / 2 e^{i\phi/2}$$

Donde hemos usado la definición del ángulo medio y definido en forma simétrica la fase ϕ .

$a_1 \equiv$ Amplitud de probabilidad de encontrar el electrón con spin up \uparrow .

$a_2 \equiv \dots$ Amplitud de probabilidad de encontrar el electrón con spin down \downarrow .

□

Ejemplo

Planteamos el mismo problema anterior, una partícula de spin $1/2$ sometida a un campo magnético constante. Esto se conoce como el experimento de Stern-Gerlach. La diferencia acá es formal: usaremos el formalismo de las matrices de Pauli y de los operadores de spin S .

Definamos las matrices de pauli y de spin.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}$$

$$S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}$$

$$S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}$$

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$[S_x, S_y] = i \hbar S_z$$

El momento dipolar magnético del electrón es

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= \gamma \vec{s} \\ H &= -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{s} \cdot \vec{B} \\ &= -\gamma s_z B_0 \end{aligned}$$

$$H = -\gamma B_0 \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$i \hbar \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = H \vec{x}$$

$$x_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad x_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

La superposición de estos estados es

$$x(t) = a x_+ e^{-i E_+ t/\hbar} + b x_- e^{-i E_- t/\hbar}$$

$$x(t) = \begin{bmatrix} a e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ b e^{\frac{-i\gamma B_0 t}{2}} \end{bmatrix}$$

$$x_0^\dagger x_0 = 1$$

$$[a^*, b^*] \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

Defino

$$\begin{aligned} a &\equiv \cos \alpha/2 \\ b &= \text{sen } \alpha/2 \end{aligned} \quad \alpha = ?$$

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= ? \\ \langle S_x \rangle &= x(t)^\dagger S_x x(t) = \frac{\hbar}{2} \text{sen } \alpha \cos(\gamma B_0 t) \\ \langle S_y \rangle &= -\frac{\hbar}{2} \text{sen } \alpha \text{sen}(\gamma B_0 t) \\ \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \alpha \end{aligned}$$

□

Ejemplo

(NO REVISADO, falta, corregir y al menos una figura ilustrativa)

A continuación se estudia el efecto Zeeman. Es un sistema con cuatro estados posibles a diferencia de los ejemplos previos que se describían con sólo dos estados posibles.

Se considera la interacción del campo magnético externo con el momento magnético del protón y del electrón. Debido a que la masa del protón μ_p es dos mil veces más pequeña que la del electrón, el momento magnético del electrón es ese mismo orden de magnitud mayor que

el del protón. el considerar esta interacción da origen a la estructura hiperfina de los niveles de energía en un átomo.

$$\uparrow B_z \quad U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

$$\hat{H} = A(\sigma^e \cdot \sigma^p) - \mu_e \vec{\sigma}^e \cdot \vec{B} - \mu_p \vec{\sigma}^p \cdot \vec{B}$$

Influencia de \vec{B} en A es despreciable

$$\hat{H} = A(\vec{\sigma}^e \cdot \vec{\sigma}^p) + \hat{H}'_{\text{pert.}}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}' |++\rangle &= -(\mu_e + \mu_p)B |++\rangle \\ \hat{H}' |+-\rangle &= -(\mu_e - \mu_p)B |+-\rangle \\ \hat{H}' |-\rangle &= -(-\mu_e + \mu_p)B |-\rangle \\ \hat{H}' |--\rangle &= (\mu_e + \mu_p)B |--\rangle \end{aligned}$$

Las ecuaciones se modifican

$$i \hbar \frac{dc_1}{dt} = \{A - (\mu_e + \mu_p)B\}c_1$$

$$i \hbar \frac{dc_2}{dt} = -\{A + (\mu_e + \mu_p)B\}c_2 + 2A c_3$$

$$i \hbar \frac{dc_3}{dt} = 2A c_2 - \{A + (-\mu_e + \mu_p)B\}c_3$$

$$i \hbar \frac{dc_4}{dt} = \{A + (\mu_e + \mu_p)B\}c_4$$

Soluciones:

$$|I\rangle \equiv |++\rangle$$

$$E_I = A - (\mu_e + \mu_p)B$$

$$|II\rangle \equiv |4\rangle \equiv |--\rangle$$

$$E_{II} = A + (\mu_e + \mu_p)B$$

El sistema de c_2 y c_3 es directo pero más largo

El resultado es

$$\begin{aligned} E_{III} &= A\left\{-1 + 2\sqrt{1 + \frac{(\mu_e - \mu_p)^2 B^2}{4A^2}}\right\} \\ E_{IV} &= -A\left\{1 + 2\sqrt{1 + \frac{(\mu_e - \mu_p)^2 B^2}{4A^2}}\right\} \\ |III\rangle &= \frac{|+-\rangle + |1-+\rangle}{\sqrt{2}} \\ |IV\rangle &= \frac{|+-\rangle - |1-+\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Análogamente

$$\frac{c_2}{c_3} |IV\rangle \langle c| \Rightarrow |3\rangle = |1-+\rangle$$

$$|j, m\rangle$$

$$|1, +1\rangle$$

$$|1, 0\rangle$$

$$|1, -1\rangle$$

$$|0, 0\rangle$$

$$\left(\frac{1}{2}\right) \oplus \left(\frac{1}{2}\right) = 1 \oplus 0$$

$$\mu = -(\mu_e + \mu_p) \quad \mu_e < 0$$

$$\mu' = -(\mu_e - \mu_p) \quad |\mu_e| \gg |\mu_p|$$

$$|\mu_e| \sim 1000\mu_p$$

$$\mu' \simeq -\mu_e(1 - 10^{-3})$$

$$\mu = -\mu_e(1 + 10^{-3})$$

$$E_I = A + \mu B$$

$$E_{II} = A - \mu B$$

$$E_{III} = A\{-1 + 2\sqrt{1 + \frac{\mu'^2 B^2}{4A^2}}\}$$

$$E_{III} \simeq A\{-1 + 2(1 + \frac{\mu'^2 B^2}{2 \cdot 4A^2})\}$$

$$E_{IV} \simeq -A\{1 + 2(1 + \frac{\mu'^2 B^2}{2 \cdot 4A^2})\}$$

$$E_{III} = +A(1 + \frac{\mu'^2 B^2}{4A})$$

$$E_{IV} = -3A - A\frac{\mu'^2 B^2}{4A}$$

$$B > A$$

$$\frac{a_2}{a_3} = \frac{E - H_{22}}{H_{11}} = \frac{E + A + \mu' B}{2A}$$

$$\frac{c_2}{c_3} |_{III} \sim \frac{\mu' B}{A} \quad \Rightarrow c_2 \gg c_3$$

$$|2\rangle = |+-\rangle$$

VII.16. Perturbaciones dependientes del tiempo. Sistemas con dos niveles

$$H_0 \psi_a = E_a \psi_a \quad , \quad H_0 \psi_b = E_b \psi_b$$

$$\langle \psi | a \rangle = \psi_a$$

Cualquier estado se ubica en una superposición

$$\psi(t) = C_a \psi_a e^{-i E_a t / \hbar} + C_b \psi_b e^{-i E_b t / \hbar}$$

Nota: el factor $e^{-i E_b t / \hbar}$, es una forma de eliminar del Hamiltoniano los términos de la diagonal.

$|C_a|^2$ es la probabilidad que la partícula se ubique en el estado a : es el estado $.a''$. (un vector columna, por ejemplo)

$$\Psi(t) = C_a(t) \psi_a e^{-i E_a t / \hbar} + C_b(t) \psi_b e^{-i E_b t / \hbar}$$

$H'(t)$: perturbación

$$H'_{aa} = H'_{bb} = 0$$

$$H \psi = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad , \quad H = H_0 + H'$$

$$(H_0 + H')(C_a(t)|a\rangle + C_b(t)|b\rangle) = i \hbar \dot{C}_a(t)|a\rangle + i \hbar \dot{C}_b(t)|b\rangle$$

$$E_a C_a(t)|a\rangle + E_b C_b(t)|b\rangle + C_a(t)H'|a\rangle + C_b(t)H'|b\rangle =$$

$$i \hbar \dot{C}_a(t)|a\rangle + i \hbar \dot{C}_b(t)|b\rangle$$

$$\langle a | \langle * \rangle \Rightarrow E_a C_a(t) + C_a(t) \cdot 0 + C_b(t) \langle a | H' | b \rangle = i \hbar \dot{C}_a$$

$$\begin{cases} E_a C_a(t) + C_b(t) H'_{ab} & = i \hbar \dot{C}_a \\ E_b C_b(t) + C_a(t) H'_{ba} & = i \hbar \dot{C}_b \end{cases}$$

$H'_{ab} = \langle a|H'|b\rangle = \langle \psi_a|H'|\psi_b\rangle$: es una función

$$\dot{C}_a = -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} C_b$$

$$\dot{C}_b = -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} C_a$$

Ejemplo: Si $H'_{ab} = \alpha \delta(t - t_0)$

Entonces

$$C_a(t) = (\quad) C_b(t_0)$$

$$C_b(t) = (\quad) C_a(t_0)$$

$$|C_a(t)|^2 + |C_b(t)|^2 = |$$

En general no se pueden resolver en forma exacta

Aproximaciones sucesivas

ORDEN ZERO : $C_a(0) = 1$, $C_b(0) = 0$

1^{er} orden : $\frac{dC_a(t)}{dt} = 0$, $\frac{dC_b(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t}$

Solución : $C_a^{(1)}(t) = C_a(0)$

$$C_b(0) = 0, \quad C_b^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt'$$

2nd orden $\frac{dC_a^{(2)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ab}(t) C_b^{(1)}(t) e^{-i\omega_0 t}$

$$= -\frac{i}{\hbar} H'_{ab}(t) e^{-i\omega_0 t} \cdot \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt'$$

$$C_a^{(2)}(t) - C_a(0) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t H'_{ab}(t') e^{-i\omega_0 t'} \left[\int_0^{t'} H'_{ba}(t'') e^{i\omega_0 t''} dt'' \right] dt',$$

$$\frac{dC_b^{(2)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ba}(t) e^{i\omega_0 t} C_a^{(1)}(t)$$

$$C_b^{(2)}(t) - C_b^{(2)}(0) = \dots$$

$$C_b^{(2)}(t) = C_b^{(1)}(t). \quad \text{No cambia}$$

Ojo que la conservación de probabilidad debe respetar el orden de aproximación H'

Ejemplo característico

$$H'(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) \cos \omega t$$

$$H'_{ab} = V_{ab} \cos \omega t$$

$$V_{ab} = \langle \psi_a | V | \psi_b \rangle$$

Suponemos $V_{aa} = V_{bb} = 0$

A primer orden $C_a(0) = 1, C_b(0) = 0$

$$C'_a(t) = C'_a(0) = 1$$

$$C_b^{(1)}(t) \simeq -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{ba} \cos \omega t' e^{+i\omega_0 t'} dt'$$

$$E_b - E_a \equiv \hbar \omega_0$$

$$\begin{aligned} C_b^{(1)}(t) &\simeq -\frac{i V_{ba}}{2\hbar} \int_0^t \left(e^{i(\omega_0 + \omega)t'} + e^{i(\omega_0 - \omega)t'} \right) dt' \\ &\simeq \frac{V_{ba}}{2\hbar} \left\{ \frac{e^{i(\omega_0 + \omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right\} \end{aligned}$$

$|\omega + \omega_0| \gg |\omega - \omega_0|$, eliminamos el 1^{er} término y obtenemos

$$\Rightarrow C_b(t) \simeq \frac{V_{ba}}{2\hbar} \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)t/2}}{\omega_0 - \omega} \left[e^{i(\omega_0 - \omega)t/2} - e^{-i(\omega_0 - \omega)t/2} \right]$$

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |C_b(t)|^2 \simeq \frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2} \frac{\text{sen}^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

Probabilidad que la molécula salta de $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ en el intervalo t

$$\frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2(\omega_0 - \omega)^2}$$

$$\frac{\pi}{\omega - \omega_0} \quad \frac{2\pi}{(\omega - \omega_0)} \quad \frac{4\pi}{(\omega - \omega_0)}$$

$$|1\rangle - |2\rangle \rightarrow |1\rangle \rightarrow |2\rangle \dots$$

Análisis cerca de la resonancia

T: fijo, veamos que pasa con la frecuencia ω

$$\frac{P_{a \rightarrow b}(\omega)}{P_{a \rightarrow b}(\omega_0)}$$

$$\omega - \omega_0 = \frac{2\pi}{T} \omega_0 \omega_0 + \frac{2\pi}{T}$$

$$\frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2} (T/2)^2 \frac{(\omega_0 - \omega)T/2}{((\omega_0 - \omega)T/2)^2}$$

$$\Delta T = \frac{\pi}{|\omega - \omega_0|} \Rightarrow \omega = \omega_0 + \frac{2\pi}{T}$$

$$\text{Area} = \frac{2\pi}{T} \cdot 1$$

$$\text{Si } \nu_0 = \frac{1}{T} = 24 \times 10^9 \text{ HZ}$$

Si $T = 10^{-13} \text{ s}$, el tiempo que la molécula de amonio permanece en la cavidad

$$\begin{aligned} \Delta\omega &= \omega - \omega_0 = \frac{\pi}{T} \simeq 3 \times 10^3 \text{ Hertz} \\ \omega_0 &= 24 \times 10^9 \text{ Hertz} \\ \omega &= 24 \times 10^9 \pm 3 \times 10^3 \\ &= \frac{3 \times 10^3}{24 \times 10^9} = \frac{1}{8} \times 10^{-6} \sim 10^{-7} \end{aligned}$$

$$L = C \cdot T = \frac{\pi}{\omega - \omega_0}$$

La molécula libera una energía $\hbar\omega_0$ en la cavidad **Ejemplo:**

$$H' = [U](\delta(t - t_0))$$

$$U_{bb} = U_{aa} = 0 \quad U_{ab} \equiv \alpha$$

$$\dot{C}_a(t) = -\frac{i}{\hbar} \alpha \delta(t - t_0) C_b(t) \cdot e^{-i\omega_0 t}$$

$$\dot{C}_b(t) = -\frac{i}{\hbar} \alpha \delta(t - t_0) e^{-i\omega_0 t} C_a(t)$$

$$\omega_0 = \frac{E_b - E_a}{\hbar}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{C}_a(t) dt = -\frac{i}{\hbar} \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t - t_0) C_b(t) e^{-i\omega_0 t} dt$$

$$C_a(\infty) - C_a(-\infty) = -\frac{i}{\hbar} \alpha e^{-i\omega_0 t_0} C_b(t_0)$$

Análogamente

$$C_b(\infty) - C_b(-\infty) = -\frac{i}{\hbar} \alpha e^{i\omega_0 t_0} C_a(t_0)$$

Incluyendo las condiciones de borde

$$C_a(-\infty) = 1 \quad , \quad C_b(-\infty) = 0 :$$

$$C_a(t) = 1 - \frac{i\alpha}{\hbar} e^{-i\omega_0 t_0} C_b(t_0),$$

$$C_b(t) = -\frac{i\alpha}{\hbar} e^{i\omega_0 t_0} C_a(t_0).$$

$$C_a(t) = 1 - \frac{id}{\hbar} e^{-i\omega_0 t_0} \cdot \frac{1}{2} C_b(t)$$

$$C_b(t) = -\frac{id}{\hbar} e^{-i\omega_0 t_0} \frac{1}{2} [1 + C_a(t)]$$

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{i\alpha}{2\hbar} e^{-i\omega_0 t_0} \\ \frac{i\alpha}{\hbar} e^{+i\omega_0 t_0} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_a(t) \\ C_b(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{i\alpha}{2\hbar} e^{i\omega_0 t_0} \end{bmatrix}$$

Multiplico la primera fila por $-\frac{i\alpha}{2\hbar} e^{i\omega_0 t_0}$, y sumo ambas

$$\begin{aligned}
 +\left(1 + \frac{\alpha^2}{4\hbar^2}\right)C_b(t) &= -\frac{i\alpha}{\hbar} e^{i\omega_0 t_0} \\
 C_b(t) &= -\frac{i e^{i\omega_0 t_0} \alpha / 2\hbar}{\left(1 + \frac{\alpha^2}{4\hbar^2}\right)} = \left(\frac{-i\alpha}{2\hbar}\right) \frac{e^{i\omega_0 t_0}}{\left(1 + \frac{\alpha^2}{4\hbar^2}\right)} \\
 C_a(t) &= 1 - \frac{id}{2\hbar} e^{-i\omega_0 t_0} \cdot \left(\frac{-i\alpha}{2\hbar}\right) \frac{e^{i\omega_0 t_0}}{\left(1 + \frac{\alpha^2}{4\hbar^2}\right)} \\
 &= 1 - \frac{\alpha^2}{4\hbar^2} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{\alpha^2}{4\hbar^2}\right)} = \frac{1}{1 + \frac{\alpha^2}{4\hbar^2}} \\
 C_a(t) &= \frac{1}{1 + \frac{\alpha^2}{4\hbar^2}}
 \end{aligned}$$

se cumple que $|C_a|^2 + |C_b|^2 = 1$

VII.17. Ejercicios

- 1.- a) Un radio transmisor opera a una longitud de onda de 100 m y a una potencia de 1 kW:
¿cuántos fotones emite por segundo?
- b) La radiación proveniente de un cuerpo negro a 500 °K alcanza la superficie de un metal
cuya función trabajo W es 0,214 ev.

- i) Usando el gráfico que se acompaña, determine la longitud de onda para la cual ocurre el máximo del espectro de emisión del cuerpo negro.
- ii) De la misma forma, determine la longitud de onda más larga que es capaz de sacar electrones desde la superficie del metal.
- iii) ¿Estime qué fracción de la emisión, M_λ , contribuye efectivamente a la producción de fotoelectrones desde la superficie?
- iv) En sólo 5 líneas, (y ninguna más!) explique el efecto fotoeléctrico.

2.- Encuentre la solución de la ecuación de Schrödinger para el potencial dibujado en la Figura, para una partícula con energía $E_o < V_o$.

- i) Escriba la solución general asociada a cada una de las regiones indicadas, y, de acuerdo a las condiciones de borde impuestas por el potencial o las condiciones físicas, determine la solución específica para cada caso, señalando sólo las constantes que sobreviven sin determinar su valor específico.
- ii) Escriba las ecuaciones que deben imponerse sobre las amplitudes de probabilidad en cada una de los bordes. (No las resuelva)
- iii) ¿Qué significado físico tiene la existencia de una amplitud de probabilidad en la región III?

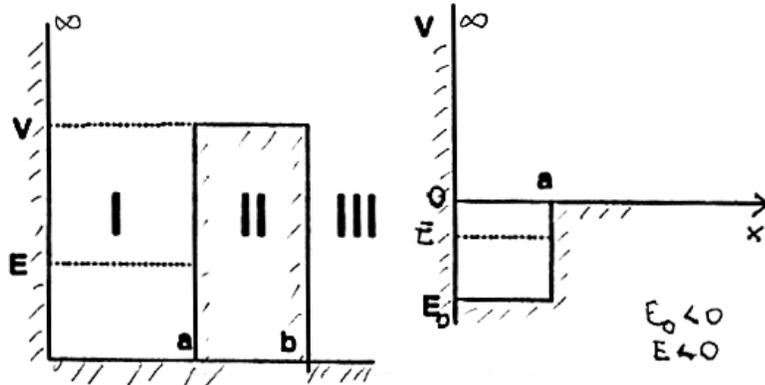
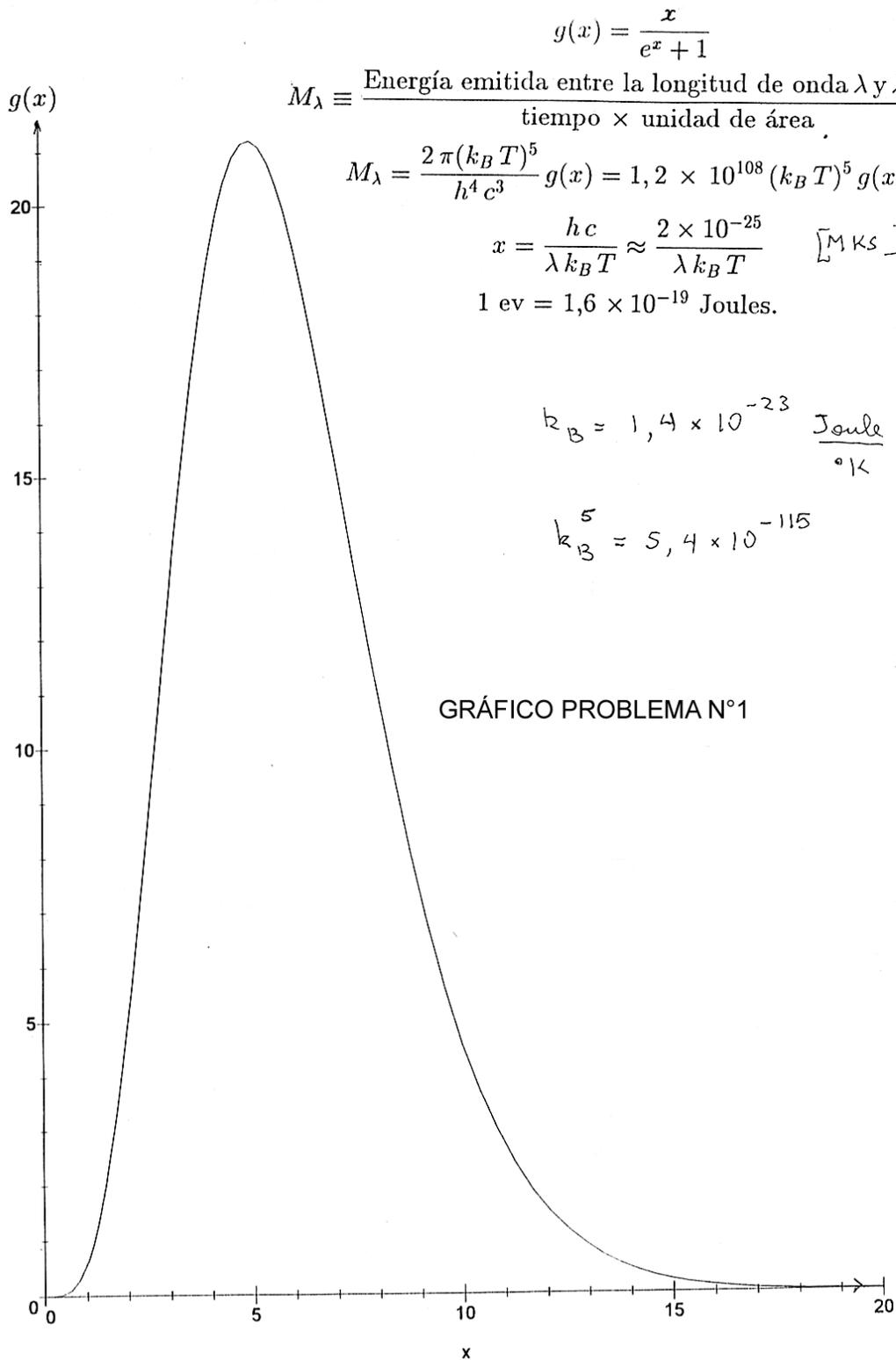


Figura VII.11: PROBLEMA # 2

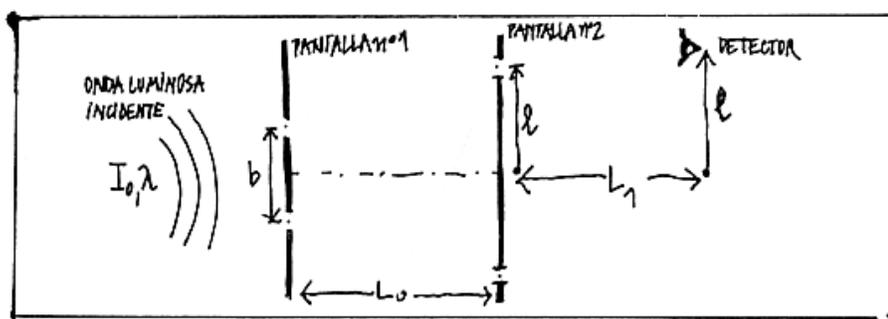
PROBLEMA # 3



3.– En el potencial unidimensional de la Figura, encuentre:

- i) La solución para todo $x > 0$. (Determine todas las constantes.)
- ii) La ecuación que determina los niveles de energía permitidos, en el caso que $E < V_0$.
- iii) Investigue qué sucede si $a \rightarrow 0$. ¿Existe algún límite –no trivial–, donde no hay estados ligados?

4.– A partir de los datos señalados en la Figura, calcule la intensidad que registra el detector debido a la interferencia producida por el par de pantallas. Suponga que $\ell = \frac{3\lambda L}{2b}$.



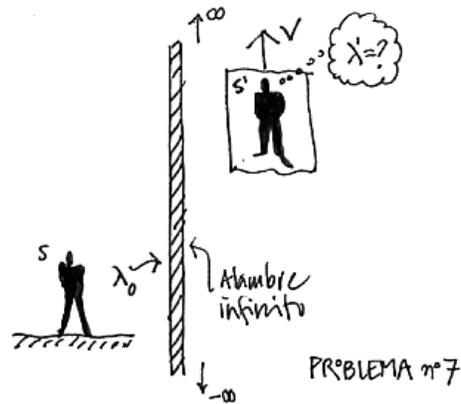
5.– Se toma una fotografía de una lámpara de Sodio de 120 Watts, ubicada a 100 m de distancia. El tiempo de exposición es de 1/100 segundos. La apertura de la cámara tiene 4 cm de diámetro. ¿Cuántos fotones penetran en la cámara durante la exposición?

La longitud de onda de la línea de emisión más intensa del átomo de Na es de 5.893 \AA . Suponga, por simplicidad, que toda la emisión del Na ocurre en esta longitud de onda.

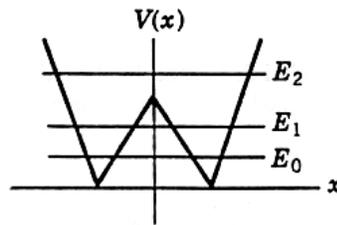
6.– En el estrato superior de la atmósfera el oxígeno molecular O_2 , es descompuesto en Oxígeno atómico debido a la acción de los fotones provenientes del Sol. Si la longitud de onda máxima de los fotones que reaccionan de esta forma con la molécula de oxígeno proviene de los fotones ultravioleta, estime –a partir de este dato–, la energía de ligazón de la molécula de Oxígeno. Expresar este valor en electron-volts.

7.– Considere un alambre infinito, recto y con densidad de carga lineal constante λ_0 [Coulomb/m], con respecto a un observador en reposo relativo. ¿Cuál es el valor de la densidad de carga λ' con respecto a un observador que se mueve con velocidad V a lo largo del alambre?

8.– Demuestre que a la luz de la física clásica, resulta imposible que un electrón aislado y por lo tanto sin ninguna interacción con otra partícula, pueda emitir un fotón.



- 9.- Un potencial fenomenológico usado en Mecánica Cuántica tiene la forma de W . Dibuje aproximadamente la forma de la amplitud de probabilidad para los tres primeros niveles de energía. Respete el sistema de coordenadas establecido en la Figura.



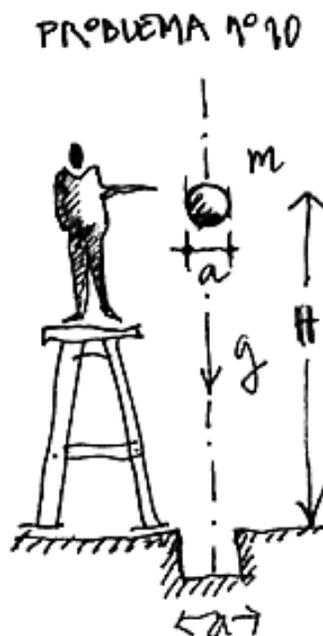
PROBLEMA n° 9

- 10.- Un niño lanza piedras verticalmente desde una altura H , usando la tecnología más reciente. Las esferas tienen una masa m y el niño se esmera en apuntarle a un orificio del mismo diámetro de la esfera que existe en el piso.

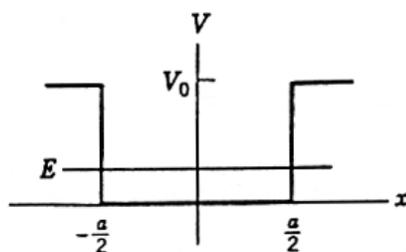
Demuestre que a pesar de su esfuerzo, las esferas caen, en promedio, a una distancia d , del eje que une ambos orificios. Con

$$d = \sqrt{\frac{h}{2\pi m}} \left[\frac{H}{g} \right]^{1/4}, \quad \text{con } h = \text{constante de Planck,}$$

- 11.- Encuentre las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el potencial dibujado en la Figura, para una partícula con energía $E_o < V_o$.



escriba la ecuación que determina los niveles de energía permitidos y determine el nivel fundamental para el caso $V_0 \rightarrow \infty$. Compare este valor de la energía con el correspondiente a otro potencial conocido.



PROBLEMA n° 11

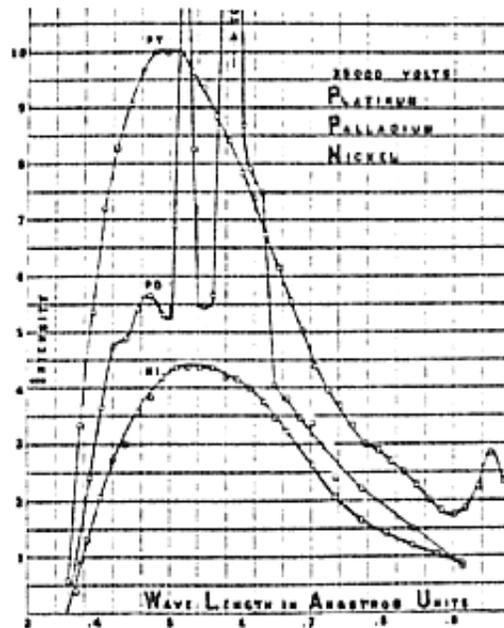
12.- Determine un rango aproximado de la longitud de onda de cada una de las clases siguientes:

i) Micro-onda, ii) Infrarrojo, iii) Visible, iv) Ultravioleta y v) Rayos γ

Experimentalmente se verifica que la molécula de amonio al realizar una transición del

estado 2 al estado 1 (el estado fundamental), emite una onda cuya frecuencia $\nu = 24 \times 10^9$ hertz \equiv ciclos/seg; clasifique esta emisión en alguna de las clases mencionadas.

- 13.– a) Explique *en palabras* qué es la energía de Fermi.
 b) Determine el valor de la energía de Fermi para el *Li*, cuya densidad es 0,53 g/cc.
- 14.– Los gráficos desplegados en la Figura, corresponden al espectro de emisión de rayos X para tres elementos anódicos diferentes, logrado con electrones acelerados con una diferencial de potencial $V_o = 35,000$ volts. A partir de la información obtenida de los gráficos determine, numéricamente el valor de h/e . Fundamente el (los) cálculos realizados para obtener su respuesta.

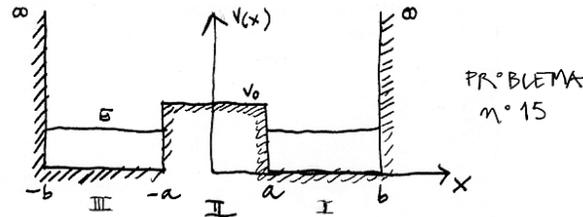


- 15.– El átomo de *N* en la molécula de amonio NH_3 , debe sobrepasar la barrera V_o (figura c)) para adoptar la forma simétrica indicada en las figuras a) y b).
 a) Escriba la ecuación de Schrödinger para $-b \leq x \leq b$. Suponga que $E < V_o$ e indique cómo obtener los dos primeros niveles de energía de esta molécula. Deje planteadas las ecuaciones que le permiten determinar las constantes que aparecen en el problema. Indique la ecuación que determina los niveles cuantizados.

Indicación: se le piden los dos primeros niveles porque debe buscar la solución par e impar, en forma separada. Para que existan estados cuantizados con energías menos que V_o , se debe imponer una relación entre el ancho de las distintas regiones del potencial.

b) ¿Qué sucede con la función de onda si $V_o \rightarrow 0$. ¿Qué sucede si $a \rightarrow 0$ con b y V_o constantes? ¿Qué sucede si $V_o \rightarrow \infty$, con a y b constantes?

(Puede responder esta pregunta en forma independiente de la parte a). De esta forma no le afectará si tiene algún resultado erróneo en la primera sección).



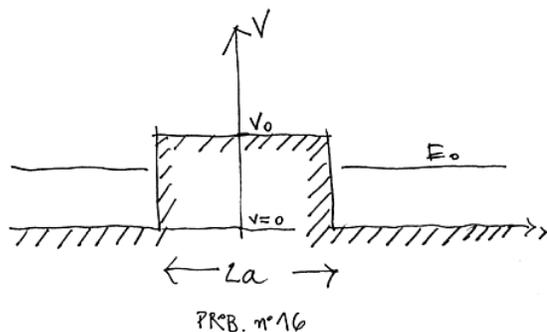
16.- En el potencial de la Figura, calcular:

- La solución de la ecuación de Schrödinger en cada una de las regiones, si $0 < E < V_o$.
- El coeficiente de reflexión y transmisión en la región que corresponda. Demuestre que se cumple: $|R|^2 + |T|^2 = 1$. Señale claramente donde ocurre cada fenómeno(s).
- La corriente de probabilidad se define como:

$$J = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right].$$

Encuentre su valor en cada una de las regiones señaladas.

- ¿Cómo se llama este efecto? ¿Qué relación tiene con la cantidad encontrada en el punto c)? ¿Puede mencionar algún ejemplo en que este fenómeno ocurra en la realidad?



17.- Desde la época del romanticismo, cuando se regalaban flores a las doncellas, se sabe que las estrellas titilan. Para saber si esta es una manifestación de la naturaleza cuántica

de la luz, estime el número de fotones que entran en el ojo de un observador cuando observa una estrella de primera magnitud. Esta estrella tiene una flujo de alrededor de 10^{-6} lúmenes por metro cuadrado. Un lumen a la longitud de onda de mayor visibilidad, 556 nm, corresponde a 0,0016 Watts. Una estrella de primera magnitud, sin ser de las más brillantes, es fácilmente visible al ojo humano. Aldebaran corresponde a este caso.

- 18.– Una fuente de luz ultravioleta de 40 Watts, cuya longitud de onda es 248 nm ilumina una superficie de Magnesio (**Mg**) situada a una distancia de 2 m. Determine el número de fotones emitido por la fuente por segundo y el número que incide sobre la superficie de Mg por segundo. La función trabajo correspondiente al Mg es de 3,68 eV. Calcule la energía cinética de los electrones más rápidos que son expelidos desde la superficie del metal. Determine el valor máximo de la longitud de onda para la cual el efecto fotoeléctrico puede ser observado.

CONSTANTES FISICAS

$1\text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19}\text{Joule}$ $m_p = 1,673 \times 10^{-27}\text{kg} = 938 \frac{\text{MeV}}{c^2}$ $\hbar = 1,055 \times 10^{-34}\text{ J - s}$ $N_A = \text{\#de Avogadro}$ $= 6,022 \times 10^{23}\text{mole}^{-1}$ $\frac{h}{m_e c} = 2,426 \times 10^{-12}\text{ m}$ $R_\infty \equiv \text{Constante de Rydberg}$ $= 1,097 \times 10^7\text{m}^{-1}$ $\hbar c = 197,3\text{ eV - nm}$ $G = 6,67 \times 10^{-11}\text{ MKS}$ $\lambda_{max} \cdot T = 2,898 \times 10^{-3}\text{ [}^\circ\text{K - m]}$ $\sigma = 5,676 \times 10^{-8}\text{ W/[m}^2\text{ }^\circ\text{K}^4]$ $R_\odot \equiv \text{Radio del Sol } \sim 7 \times 10^8\text{ m}$	$m_e = 9,1 \times 10^{-31}\text{kg} = 0,511 \frac{\text{MeV}}{c^2}$ $h = 6,626 \times 10^{-34}\text{ J - s} = 4,136 \times 10^{-15}\text{ eV-s}$ $\hbar = 6,582 \times 10^{-16}\text{ eV-s}$ $k_B \equiv \text{Constante de Boltzmann}$ $= 1,4 \times 10^{-23}\text{ J/}^\circ\text{K} = 8,62 \times 10^{-5} \frac{\text{eV}}{^\circ\text{K}}$ $a_o \equiv \text{Radio de Bohr} = 5,292 \times 10^{-11}\text{ m}$ $\frac{e^2}{\hbar c} \equiv \text{Constante de estructura fina} = 1/137$ $\frac{1}{4\pi\epsilon_o} = 8,988 \times 10^9 \frac{\text{N - m}^2}{c^2}$ $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_o} = 1,440\text{ eV-nm}$ $L_\odot \equiv \text{Luminosidad del Sol } \sim 3,2 \times 10^{33}\text{ ergs/s}$ $\sigma \equiv \text{Constante de Stefan-Boltzmann}$ $1\text{AU} \equiv \text{Distancia Sol-Tierra } \simeq 1,5 \times 10^{13}\text{ cm}$
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Bibliografía

- [1] **Conceptos de Relatividad y Teoría Cuántica**, R. Resnik. 1976, Ed. Limusa, México.
- [2] **The Emperor's New Mind**, Concerning computers, minds and the laws of physics, Roger Penrose, 1991, Penguin Book.
- [3] **Física**, M. Alonso y R. Finn, Vol III, primeras 100 páginas.
- [4] **Quantum Physics**, E. H. Wichmann, Vol. 4, Serie de Berkeley.
- [5] **Introduction to the Structure of Matter**, J. J. Brehm and W. J. Mullin, John Wiley and Son, 1989.
- [6] **Ondas**, J.S. Crawford Jr., Vol III, Serie de Berkeley.
- [7] Cualquier libro de Física General que incluya Física Moderna.
- [8] **Física Cuántica**, R. Eisberg and R. Resnick. Relatividad Especial, es de utilidad para este curso.
- [9] Física Cuántica a través del Tiempo, D. Deutch y M. Lockwood, **Investigación y Ciencia**, Mayo, 1994.
- [10] **Teoría Unificada de las Partículas Elementales y las Fuerzas**, H. Georgi, **Investigación y Ciencia**, Junio 1981.
- [11] **Quantum Cryptography**, Ch. H. Bennett, G. Brassard and A. A. Ekert, Scientific American, Octubre 1992.
- [12] **Quantum seeing in the dark**, P. Kwiat, H. Weinfurter and A. Zeilinger **Scientific American**, November 1996.
- [13] **Los Tres Primeros Minutos**, Steve Weinberg. (Biblioteca de Física.).
- [14] **QED, o La Extraña Historia de la Radiación y la Materia**, Richard Feynman (Biblioteca de Física y Central).

- [15] **El Lado Izquierdo de la Creación**, J. D. Barrow y J. Silk, Fondo de Cultura Económica, (Biblioteca Central).
- [16] **Atrapando la Luz**, A. Zajonc, (Biblioteca Central).



"En realidad yo empecé con la mecánica cuántica, pero en algún lugar del camino tomé la vuelta equivocada"