Universidad Autónoma de Baja California-FIAD

MANUAL DE APUNTES

FÍSICA MODERNA

Profesor: Mata Ramírez Jorge Octavio

11 de diciembre de 2021

Debate 1. Principios de Física Moderna

Física Moderna

El trabajo de Newton en este campo perdura hasta la actualidad, ya que todos los fenómenos macroscópicos pueden ser descritos de acuerdo a sus tres leyes. Por eso durante el resto de ese siglo y en el posterior, el siglo XVIII, todas las investigaciones se basaron en sus ideas. De ahí que se desarrollaron otras disciplinas como la termodinámica, la óptica, la mecánica de fluidos y la mecánica estadística. Los conocidos trabajos de Daniel Bernoulli, Robert Boyle y Robert Hooke, entre otros, pertenecen a esta época.

En el siglo XIX se produjeron avances fundamentales en la electricidad y el magnetismo, principalmente de la mano de Charles-Augustin de Coulomb, Luigi Galvani, Michael Faraday y Georg Simon Ohm, que culminaron en el trabajo de James Clerk Maxwell en 1855, que logró la unificación de ambas ramas en el llamado electromagnetismo. Además, se producen los primeros descubrimientos sobre radiactividad y el descubrimiento del electrón por parte de Joseph John Thomson en 1897.

Durante el siglo XX, la física se desarrolló plenamente. En 1904, Hantarō Nagaoka había propuesto el primer modelo del átomo, el cual fue confirmado en parte por Ernest Rutherford en 1911, aunque ambos planteamientos serían después sustituidos por el modelo atómico de Bohr, de 1913. En 1905, Einstein formuló la teoría de la relatividad especial, la cual coincide con las leyes de Newton al decir que los fenómenos se desarrollan a velocidades pequeñas comparadas con la velocidad de la luz. En 1915 extendió la teoría de la relatividad especial, formulando la teoría de la relatividad general, la cual sustituye a la ley de gravitación de Newton y la comprende en los casos de masas pequeñas. Max Planck, Albert Einstein, Niels Bohr y otros, desarrollaron la teoría cuántica, a fin de explicar resultados experimentales anómalos sobre la radiación de los cuerpos. En 1911, Ernest Rutherford dedujo la existencia de un núcleo atómico cargado positivamente, a partir de experiencias de dispersión de partículas. En 1925 Werner Heisenberg, y en 1926 Erwin Schrödinger y Paul Adrien Maurice Dirac, formularon la mecánica cuántica, la cual comprende las teorías cuánticas precedentes y suministra las herramientas teóricas para la Física de la materia condensada.

Posteriormente se formuló la teoría cuántica de campos, para extender la mecánica cuántica de acuerdo con la Teoría de la Relatividad especial, alcanzando su forma moderna a finales de la década de 1940, gracias al trabajo de Richard Feynman, Julian Schwinger, Shin'ichirō Tomonaga y Freeman Dyson, los cuales formularon la teoría de la electrodinámica cuántica. Esta teoría formó la base para el desarrollo de

la física de partículas. En 1954, Chen Ning Yang y Robert Mills desarrollaron las bases del modelo estándar. Este modelo se completó en los años 1970, y con él fue posible predecir las propiedades de partículas no observadas previamente, pero que fueron descubiertas sucesivamente, siendo la última de ellas el quark top.

Los intentos de unificar las cuatro interacciones fundamentales han llevado a los físicos a nuevos campos impensables. Las dos teorías más aceptadas, la mecánica cuántica y la relatividad general, que son capaces de describir con gran exactitud el macro y el micromundo, parecen incompatibles cuando se las quiere ver desde un mismo punto de vista. Por eso se han formulado nuevas teorías, como la supergravedad o la teoría de cuerdas, donde se centran las investigaciones a inicios del siglo XXI. Esta ciencia no desarrolla únicamente teorías, también es una disciplina de experimentación. Sus hallazgos, por lo tanto, pueden ser comprobados a través de experimentos. Además, sus teorías permiten establecer previsiones sobre pruebas que se desarrollen en el futuro.

Siglo XIX: electromagnetismo y estructura atómica

La noción teórica de campo de fuerzas fue un desarrollo teórico del siglo XIX que fue crucial para la comprensión de los fenómenos electromagnéticos, en la figura esquema de líneas de líneas de campo magnético alrededor de un imán.

La investigación física de la primera mitad del siglo XIX estuvo dominada por el estudio de los fenómenos de la electricidad y el magnetismo. Coulomb, Luigi Galvani, Faraday, Ohm y muchos otros físicos famosos estudiaron los fenómenos dispares y contraintuitivos que se asocian a este campo. En 1855 Maxwell unificó las leyes conocidas sobre el comportamiento de la electricidad y el magnetismo en una sola teoría con un marco matemático común mostrando la naturaleza unida del electromagnetismo. Los trabajos de Maxwell en el electromagnetismo se consideran frecuentemente equiparables a los descubrimientos de Newton sobre la gravitación universal y se resumen con las conocidas, ecuaciones de Maxwell, un conjunto de cuatro ecuaciones capaz de predecir y explicar todos los fenómenos electromagnéticos clásicos. Una de las predicciones de esta teoría era que la luz es una onda electromagnética. Este descubrimiento de Maxwell proporcionaría la posibilidad del desarrollo de la radio unas décadas más tarde por Heinrich Hertz en 1888.

En 1895 Roentgen descubrió los rayos X, ondas electromagnéticas de frecuencias muy altas. Casi simultáneamente, Henri Becquerel descubría la radioactividad en 1896. Este campo se desarrolló rápidamente con los trabajos posteriores de Pierre Curie, Marie Curie y muchos otros, dando comienzo a la física nuclear y al comienzo de la estructura microscópica de la materia.

En 1897 Thomson descubrió el electrón, la partícula elemental que transporta la corriente en los circuitos eléctricos proponiendo en 1904 un primer modelo simplificado del átomo.

Física moderna

La mecánica cuántica reintrodujo de nuevo el indeterminismo en la física, al introducir elementos de incertidumbre y probabilidad en la teoría física. Simplificadamente una partícula subatómica estable se puede describir por una función de onda a partir de la cual pueden calcularse las probabilidades de mediciones experimentales sobre la partícula. En la figura un esquema de una partícula encerrada en una caja bidimensional. Las líneas de nivel sobre el plano inferior están relacionadas con la probabilidad de presencia.

La física moderna comienza entre finales del siglo XIX y principios del siglo XX. Aunque se han realizado experimentos de física moderna con anterioridad, se considera como punto de inicio de la física moderna el año 1900, cuando el alemán Max Planck propone la idea del «cuanto de acción». Planck propuso la idea de que la energía se dividía en unidades indivisibles, y que ésta no era continua como decía la física clásica; es decir, que todos los niveles de energía posibles son múltiplos de un nivel de energía mínimo llamado cuanto. Por ello nace esta nueva rama de la física, que estudia las manifestaciones que se producen en los átomos, los comportamientos de estas partículas que forman la materia y las fuerzas que las rigen. Se conoce, generalmente, por estudiar los fenómenos que se producen a la velocidad de la luz o valores cercanos a ella, o cuyas escalas espaciales son del orden del tamaño del átomo o inferiores.

Los temas anteriormente tratados de la física clásica no servían para resolver los problemas presentados, ya que estos se basan en certezas y la física moderna en probabilidades, lo que provocó dificultades para adaptarse a las nuevas ideas.

Uno de los enfoques de la física actual es comprender la relación entre las fuerzas que rigen la naturaleza, la gravedad, el electromagnetismo, la fuerza nuclear fuerte y la fuerza nuclear débil. Comprender y lograr una teoría de unificación, para así poder entender el universo y sus partículas.

La física moderna se suele dividir en dos ramas principales, la mecánica cuántica, útil para abordar temas como la física nuclear, atómica o molecular, y la teoría de la relatividad, útil para abordar temas como la cosmología.

Cuestionario

1. ¿Qué parte del electromagnetismo se desarrolla en el siglo XIX?
2. ¿Qué es la física moderna?

Debate 2. La teoría de la relatividad

- HOY sí que vas a entender la relatividad especial https://www.youtube.com/watch?v=lT4OLf4yyuU
- Relatividad general de Einstein - ¿Qué es la gravedad? https://www.youtube.com/watch?v=PnDzK4cFiOs

Tarea:

- https://www.youtube.com/watch?v=RwGkq2JYsY8

La Teoría de la Relatividad de Einstein explicada en cuatro simples pasos

El físico utilizó su imaginación en lugar de las matemáticas para elaborar su mítica ecuación. La teoría de la relatividad de Albert Einstein es famosa por su predicción de fenómenos bastante extraños pero reales, como el envejecimiento más lento de los astronautas respecto a las personas que vivimos en la Tierra y el cambio en la forma de los objetos a altas velocidades.

La verdad es que si tienes una copia del artículo original de Einstein de 1905 sobre la relatividad, es de lectura fácil. El texto es sencillo y claro y sus ecuaciones son, en su mayoría, álgebra: nada que presente un problema para un estudiante de instituto.

Eso se debe a que el objetivo de Einstein nunca fue elaborar una estrafalaria teoría matemática. Le gustaba pensar de forma visual, creando experimentos en su mente e intentando solucionarlos en su cabeza hasta poder ver las ideas y los principios físicos con una claridad cristalina.

A continuación te explicamos cómo Einstein comenzó sus experimentos mentales con solo 16 años y cómo esto le llevó finalmente a crear la ecuación más revolucionaria de la física moderna.

1895: Persiguiendo un rayo de luz

Para entonces, el desprecio mal disimulado de Einstein por los métodos educativos rígidos y autoritarios de su Alemania natal ya le había supuesto la expulsión del equivalente actual de instituto, por ello se mudó a Zúrich con la esperanza de asistir a la Escuela Politécnica Federal (ETH).Sin embargo, Einstein decidió que primero asistiría durante un año a una escuela en Aarau, una ciudad cercana, para prepararse. La institución hacía hincapié en métodos vanguardistas como el pensamiento independiente y la visualización de conceptos. En ese entorno feliz, pronto empezó a preguntarse cómo sería correr junto a un rayo de luz.

Einstein ya había aprendido en la clase de física qué era un rayo de luz: una serie de campos eléctricos y magnéticos oscilantes que se mueven a 299.792 metros por segundo, la medida de la velocidad de la luz. Si corriera junto a un rayo de luz a esa velocidad, razonaba Einstein, podría ser capaz de observar una serie de campos magnéticos y eléctricos oscilantes justo a su lado, que en el espacio serían aparentemente estáticos.

Pero eso era imposible. Para empezar, dichos campos estáticos violarían las ecuaciones de Maxwell, las leyes matemáticas que codificaban todo aquello que conocían los físicos del momento sobre la electricidad, el magnetismo y la luz. Las leyes eran (y son) bastante estrictas: cualquier onda en los campos tiene que moverse a la velocidad de la luz y no puede permanecer estática, sin excepciones.

Y lo que es peor: los campos estáticos no encajarían con el principio de relatividad, una noción que los físicos han asumido desde los tiempos de Galileo y la era de Newton en el siglo XVII. Básicamente, la relatividad afirmaba que las leyes de la física no podían depender de la velocidad a la que te movieras; todo lo que podías medir era la velocidad de un objeto en relación a otro.

Pero cuando Einstein aplicó este principio en su experimento mental, originó una contradicción: la relatividad dictaba que cualquier cosa que pudiera ver mientras corriese junto a un rayo de luz, incluyendo los campos estáticos, también debería ser algo que los físicos de la Tierra pudiesen crear en el laboratorio. Pero nunca se había observado algo así.

Einstein dio vueltas a este problema durante otros 10 años, durante sus años de universitario en la ETH y tras mudarse a Berna, capital de Suiza, donde se convirtió en examinador en la oficina de patentes suiza. Allí fue donde consiguió resolver la paradoja de una vez por todas.

1904: Medición de la luz desde un tren en movimiento

No fue tarea fácil. Einstein puso a prueba todas las soluciones en las que pudo pensar, pero nada funcionaba. Empujado por la desesperación, empezó a pensar en una noción simple pero radical. Las ecuaciones de Maxwell funcionan para todo, pensó, pero quizá la velocidad de la luz siempre haya sido constante.

En otras palabras, cuando ves pasar volando un rayo de luz, no importa si su fuente se mueve hacia ti, se aleja de ti o se desplaza hacia un lado, ni tampoco importaría la rapidez a la que se mueve dicha fuente. Siempre medirías la velocidad del rayo a 299.792 metros por segundo. Entre otras cosas, eso significaba que Einstein jamás podría ver campos estáticos oscilantes, porque nunca podría atrapar ese rayo de luz.

Esta era la única forma en la que Einstein podía reconciliar las ecuaciones de Maxwell con el principio de relatividad. Aun así, en un principio parecía que su solución tenía un gravísimo defecto. Einstein explicó posteriormente el problema mediante otro experimento mental: imagina disparar un rayo de luz a lo largo de una vía férrea mientras un tren circula en la misma dirección a unos 3.200 metros por segundo.

Alguien que esté junto a las vías mediría la velocidad del rayo de luz mediante el número estándar: 299.792 metros por segundo. Si la velocidad de la luz no fuera constante, las ecuaciones de Maxwell tendrían que funcionar de forma diferente dentro del vagón de tren y se habría violado el principio de relatividad, concluyó Einstein.

Esta aparente contradicción dejó a Einstein devanándose los sesos durante casi un año. Más adelante, en una hermosa mañana de mayo de 1905, se dirigía al trabajo con su mejor amigo, Michele Besso, ingeniero al que conocía desde sus días como estudianteen Zúrich. Ambos estaban debatiendo el dilema de Einstein, algo que hacían con frecuencia. Y de repente, Einstein vio la solución. Trabajó toda la noche y cuando se volvieron a ver la mañana siguiente, Einstein le dijo a Besso: «Gracias. He resuelto completamente el problema».

Mayo de 1905: Un rayo alcanza un tren en movimiento

La revelación de Einstein consistía en que los observadores en movimiento relativo experimentan el tiempo de forma diferente: es perfectamente posible que dos acontecimientos tengan lugar de forma simultánea desde la perspectiva de un observador, pero que ocurran en momentos diferentes desde la perspectiva del otro. Y ambos observadores estarían en lo cierto.

Einstein ilustraría posteriormente este argumento mediante otro experimento mental. Imagina que de nuevo tienes un observador que está junto a las vías mientras pasa el tren. Pero este momento, un rayo alcanza el primer y último vagón justo cuando

pasa frente a él el vagón central del tren. Debido a que ambos impactos ocurren a la misma distancia del observador, su luz llega al ojo al mismo tiempo. Así que este observador puede afirmar sin equivocarse que ambos han sucedido de manera simultánea.

Mientras tanto, el otro observador está sentado en el punto medio exacto de este tren. Desde su perspectiva, la luz de ambos impactos también tiene que viajar la misma distancia, y del mismo modo medirá la velocidad de la luz como igual en ambas direcciones. Pero debido al movimiento del tren, la luz que procede del rayo en el vagón de cola tiene que viajar más distancia hasta el observador, alcanzándolo unos instantes más tarde respecto a la luz procedente del primer vagón. Debido a que los pulsos de luz han llegado en momentos diferentes, dicho observador solo puede concluir que los impactos no han sido simultáneos y que el impacto frontal sucedió primero.

En resumen, Einstein se dio cuenta de que lo que es relativo es la simultaneidad. Una vez aceptas eso, todos los efectos extraños que asociamos a la relatividad son simplemente una cuestión de álgebra.

Einstein redactó rápidamente sus ideas en un estado de euforia extrema y envió su artículo para que fuera publicado pocas semanas después. Le otorgó un título (Sobre la electrodinámica de cuerpos en movimiento) que reflejaba su lucha por reconciliar las ecuaciones de Maxwell con el principio de la relatividad. Como conclusión incluyó un agradecimiento a Besso («a quien agradezco por algunas sugerencias valiosas») lo que garantizó a su amigo ser recordado por la posteridad.

Septiembre de 1905: Masa y energía

Sin embargo, este primer artículo no fue el último. Einstein siguió obsesionado con la relatividad durante todo el verano de 1905 y en septiembre envió un segundo artículo como una especie de idea adicional.

Estaba basado en otro experimento mental. Imagina un objeto en reposo, escribía. Ahora imagina que espontáneamente emite dos pulsos de luz idénticos en direcciones opuestas. Este objeto permanecerá quieto, pero debido a que cada pulso transporta cierta cantidad de energía, el contenido de energía del propio objeto disminuirá.

Ahora bien, decía Einstein, ¿cómo vería este proceso un observador en movimiento? Desde su perspectiva, el objeto simplemente seguiría moviéndose en línea recta mientras los dos pulsos echan a volar. Pero aunque la velocidad de los pulsos sería la misma (la velocidad de la luz) sus energías serían diferentes: el pulso que se mueve hacia delante, en la dirección del movimiento, tendría una energía mayor que el que se mueve hacia detrás.

Mediante fórmulas algebraicas, Einstein demostró que para que todo esto fuera coherente, el objeto no solo tiene que perder energía cuando emite estos pulsos de luz, sino que también tendría que perder un poco de masa. O, en otras palabras, la masa y la energía son intercambiables.

Einstein escribió una ecuación en la que relacionaba ambos conceptos. Empleando la notación actual, que abrevia la velocidad de la luz mediante la letra c, creó la que probablemente sea la ecuación más famosa de la historia: E = mc2.

Debate 3. Paradoja de los gemelos

- La paradoja de los gemelos https://www.youtube.com/watch?v=lPEo0wDiU0c
- Transformaciones de Lorentz https://www3.gobiernodecanarias.org/medusa/ecoblog/mramrodp/2017/04/14/fisica-del-siglo-xx-relatividad/
- ¿Por qué nada puede viajar más rápido que la velocidad de la luz? https://www.youtube.com/watch?v=I2pqlMr6lVw

PARADOJA DE LOS GEMELOS

La paradoja de los gemelos (o paradoja de los relojes) es un experimento mental que analiza la distinta percepción del tiempo entre dos observadores con diferentes estados de movimiento.
Esta paradoja fue propuesta por Albert Einstein al desarrollar lo que hoy se conoce como la teoría de la relatividad especial. Dicha teoría postula que la medida del tiempo no es absoluta, y que, dados dos observadores, el tiempo medido entre dos eventos por estos observadores, en general, no coincide, sino que la diferente medida de tiempos depende del estado de movimiento relativo entre ellos. Así, en la teoría de la relatividad, las medidas de tiempo y espacio son relativas, y no absolutas, ya que dependen del estado de movimiento del observador. En ese contexto es en el que se plantea la paradoja.

Formulación de la paradoja

En la formulación más habitual de la paradoja, debida a Paul Langevin, se toma como protagonistas a dos gemelos (de ahí el nombre); el primero de ellos hace un

largo viaje a una estrella en una nave espacial a velocidades cercanas a la velocidad de la luz; el otro gemelo se queda en la Tierra. A la vuelta, el gemelo viajero es más joven que el gemelo terrestre.

De acuerdo con la teoría especial de la relatividad, visto desde la perspectiva del sistema de referencia de la Tierra, el gemelo que se queda envejecerá más que el gemelo que viaja por el espacio a gran velocidad (más adelante se prueba esto mediante cálculo) porque el reloj del gemelo de la nave espacial va más lento que el del que permanece en la Tierra y, por tanto, el de la Tierra envejece más rápido que su hermano.

Pero la paradoja surge cuando se hace la siguiente observación: visto desde la perspectiva del gemelo que va dentro de la nave, el que se está alejando, en realidad, es el gemelo en la Tierra (de acuerdo con la Invariancia galileana) y, por tanto, cabría esperar que, de acuerdo con los cálculos de este gemelo, su hermano en la Tierra sería quien tendría que envejecer menos por moverse respecto de él a velocidades cercanas a la de la luz. Esto es, el gemelo de la nave es quien tendría que envejecer más rápido.

La paradoja quedaría dilucidada si se pudiese precisar quién envejece más rápido realmente y qué hay de erróneo en la suposición de que, de acuerdo con los cálculos del gemelo de la nave, es el gemelo terrestre quien envejece menos.

Solución de la paradoja según la teoría de la relatividad especialA Einstein le costó aclarar esta paradoja unos cuantos años, hasta que formuló la relatividad general y demostró que, ciertamente, es el gemelo de la Tierra quien envejece más rápido.

Sin embargo, aunque Einstein resolvió la paradoja en el contexto de la relatividad general, la paradoja puede resolverse dentro de los límites de la teoría de la relatividad especial, como muestra este artículo.

Para dilucidar la aparente paradoja es necesario realizar los cálculos desde el punto de vista del gemelo que permanece en la Tierra y desde el punto de vista del gemelo viajero, y ver que las estimaciones de tiempo transcurrido coinciden examinadas desde ambos puntos de vista.

El cálculo desde el punto de vista del gemelo terrestre es rutinario y muy sencillo. El cálculo desde el punto de vista del gemelo viajero es más complejo porque requiere realizar cálculos en un sistema no inercial. A continuación, se presentan las predicciones de la teoría aplicadas a ambos gemelos y se prueba que los resultados coinciden, demostrando que la aparente paradoja no es tal.

Cálculo según el gemelo terrestre

Un posible esquema del viaje de ida y vuelta del gemelo viajero, en cinco fases: alejamiento acelerado, alejamiento a velocidad constante, frenado y cambio de sentido, acercamiento a velocidad constante, frenado hasta reencontrarse con el gemelo terrestre.

Las condiciones del experimento requieren que el gemelo viajero se aleje de la Tierra y más tarde regrese, lo cual necesariamente implica tener en consideración aceleraciones positivas y negativas. Simplificadamente, supondremos que el experimento puede llevarse a cabo en 5 etapas:

1. En el instante de tiempo t = 0 el gemelo viajero parte con "(pseudo)aceleración" (medida por el gemelo de la Tierra) ω = F/m constante que lo aleja de ella. Se mueve aceleradamente entre los instantes medidos por el gemelo terrestre t = 0 y t = T1, llegando a la velocidad V.

2. Cuando el gemelo viajero llega a una velocidad V apaga los motores de su nave, y sigue alejándose de la Tierra, ahora a velocidad constante. Durante esta etapa comprendida entre los instantes t = T1 y t = T1+T2 el gemelo viajero se aleja de la Tierra a velocidad V.

3. Después de un tiempo viajando a velocidad uniforme el gemelo viajero pone en marcha los motores de su nave en sentido contrario y desacelera con la misma aceleración con la que aceleró, así transcurrido un tiempo de deceleración T1 (medido por el gemelo en la Tierra) la velocidad será nula, y transcurrido otro intervalo T1 la velocidad será -V (donde el signo negativo indica que la velocidad es en sentido contrario al que utilizó en su viaje de ida).

4. Una vez alcanzada la velocidad -V que hace que el gemelo viajero se aproxime a la Tierra de regreso con velocidad uniforme, el gemelo viajero permanece viajando aproximándose a la Tierra durante un intervalo de tiempo T2.

5. Finalmente, para poderse reencontrar con su gemelo en la Tierra, el gemelo viajero desacelera, hasta llegar a la Tierra en reposo, eso requiere una aceleración igual a las anteriores aplicada durante un intervalo de tiempo T1.

Por construcción la duración del viaje medido por el gemelo situado en la Tierra, es la suma de los tiempos de cada etapa, ya que hemos definido esas etapas a partir de lecturas del gemelo en la Tierra, para este gemelo la duración del viaje ha sido:
$T_{viaje} = T_1 + T_2 + 2T_1 + T_2 + T_1 = 4T_1 + 2T_2$
Ahora podemos comparar qué tiempo estima el gemelo de la Tierra que habrá medido su gemelo viajero. Para ello procedemos por etapas. En la primera etapa el

tiempo que el gemelo de la Tierra estima ha transcurrido para el gemelo viajero, usando la relación entre la (pseudo)aceleración y la velocidad en un movimiento acelerado relativista, viene dado por:

$$\bar{T}_1 = \int_0^{T_1} \sqrt{1 - \frac{v^2(t)}{c^2}} dt = \int_0^{T_1} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{w^2 t^2}{c^2}}} dt = \frac{c}{w} \ln \left[\frac{wT_1}{c} + \sqrt{1 + \frac{w^2 T_1^2}{c^2}} \right]$$

Entre los instantes tiempo t = T1 y t = T1+T2 (medidos por el gemelo terrestre) la nave espacial se mueve con velocidad uniforme V por tanto:

$$\bar{T}_2 = \int_{T_1}^{T_1+T_2} \sqrt{1 - \frac{v^2(t)}{c^2}} dt = \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} \int_{T_1}^{T_1+T_2} dt = \frac{T_2}{\sqrt{1 + \frac{w^2 T_1^2}{c^2}}}$$

Juntando los resultados anteriores, en el momento del encuentro de acuerdo con los cálculos del gemelo terrestre, él y su gemelo viajero habrán notado tiempos diferentes de viaje dados por:

$$\begin{cases} T_{viaje} = 4T_1 + 2T_2 \\ \bar{T}_{viaje} = 4\bar{T}_1 + 2\bar{T}_2 = \frac{4c}{w} \ln \left[\frac{wT_1}{c} + \sqrt{1 + \frac{w^2 T_1^2}{c^2}} \right] + 2T_2 \left[\sqrt{1 + \frac{w^2 T_1^2}{c^2}} \right]^{-1} \end{cases}$$

Es sencillo comprobar que para cualesquiera valores de W, T1 y T2, el segundo tiempo es siempre menor que el primero: Tviaje - Tviaje > 0 , y por tanto, según el gemelo terrestre él mismo envejecerá más que el gemelo viajero.

Cuestionario:

1. Explicar con tus palabras la paradoja de los Gemelos

Debate 4. Transformaciones de Lorentz

Transformaciones de Galileo y Lorentz

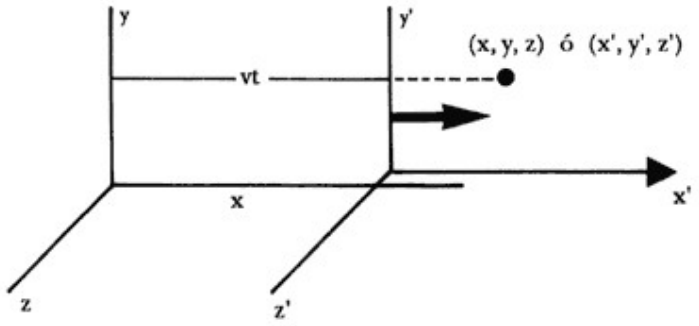
Transformaciones de Galileo

Las transformaciones de Galileo son la base de la mecánica Newtoniana, lo que se puede llamar la física pre-relativista (en el sentido de relatividad especial).

Estas transformaciones son aquellas que nos permiten transformar los sistemas inerciales de forma que las leyes de la mecánica sean las mismas para todos ellos.

Tomemos dos sistemas inerciales, S y S'. Por simplicidad supondremos que el sistema S' se mueve a velocidad constante (v) a lo largo del eje X del sistema S y en su sentido positivo. Hemos de recordar que la mecánica Newtoniana-Galileana se construye sobre la base de un espacio-tiempo en el que el tiempo es absoluto (t=t´) para todo observador, por tanto no se permiten cambios en las mediciones de intervalos temporales para distintos observadores. Con estos ingredientes podemos entender que las transformaciones de Galileo toman la siguiente forma:

$$x' = x - Vt$$
$$y' = y$$
$$z' = z$$



Las transformaciones de Lorentz, dentro de la teoría de la relatividad especial, son un conjunto de relaciones que dan cuenta de cómo se relacionan las medidas de una magnitud física obtenidas por dos observadores diferentes. Estas relaciones establecieron la base matemática de la teoría de la relatividad especial de Einstein, ya que las transformaciones de Lorentz precisan el tipo de geometría del espacio-tiempo requeridas por la teoría de Einstein.
Matemáticamente el conjunto de todas las transformaciones de Lorentz forman el grupo de Lorentz.

Historia

Históricamente las transformaciones de Lorentz fueron introducidas por Hendrik Antoon Lorentz (1853 - 1928), que las había introducido fenoménicamente para resolver ciertas inconsistencias entre el electromagnetismo y la mecánica clásica. Lorentz había descubierto en el año 1900 que las ecuaciones de Maxwell resultaban invariantes bajo este conjunto de transformaciones, ahora denominadas transformaciones de Lorentz. Al igual que los demás físicos, antes del desarrollo de la teoría de la relatividad, asumía que la velocidad invariante para la transmisión de las ondas electromagnéticas se refería a la transmisión a través de un sistema de referencia privilegiado, hecho que se conoce con el nombre de hipótesis del éter. Sin embargo, tras la interpretación por parte de Albert Einstein de dichas relaciones

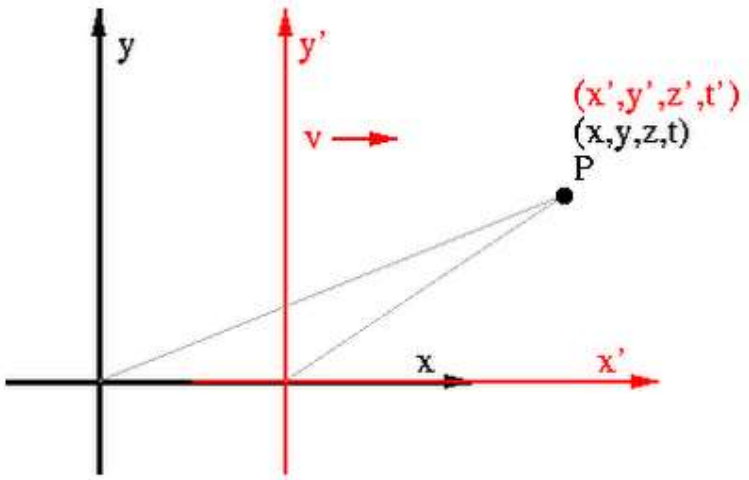
como transformaciones de coordenadas genuinas en un espacio-tiempo tetradimensional la hipótesis del éter fue puesta en entredicho.

Las transformaciones de Lorentz fueron publicadas en 1904 pero su formalismo matemático inicial era incorrecto. El matemático francés Poincaré desarrolló el conjunto de ecuaciones en la forma consistente en la que se conocen hoy en día. Los trabajos de Minkowski y Poincaré mostraron que las relaciones de Lorentz podían interpretarse como las fórmulas de transformación para rotación en el espacio-tiempo cuatridimensional, que había sido introducido por Minkowski.

Transformaciones de Lorentz

Las ecuaciones o transformaciones de Lorentz consisten, al igual que las de Galileo, en el establecimiento de un mecanismo de transformación de valores entre sistemas de referencia (S y S') con movimiento relativo con velocidad ventre ellos, pero con una velocidad máxima c igual para dichos sistemas de referencia. Es decir, la velocidad máxima no sería aditiva con el cambio de referencia del origen.

Las transformaciones de Lorentz, dentro de la teoría de la relatividad especial, son un conjunto de relaciones que dan cuenta de cómo se relacionan las medidas de una magnitud física obtenidas por dos observadores diferentes. Estas relaciones establecieron la base matemática de la teoría de la relatividad especial de Einstein, ya que las transformaciones de Lorentz precisan el tipo de geometría del espacio-tiempo requeridas por la teoría de Einstein.



DIRECTAS	INVERSAS
$x' = \frac{x - Vt}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}$	$x = \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}$
$y' = y$	$y = y'$
$z' = z$	$z = z'$
$t' = \frac{t - \frac{V}{c^2}x}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}$	$t = \frac{t' + \frac{V}{c^2}x'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}$

Transformaciones de Lorentz

Las transformaciones de Lorentz surgen a partir de las ecuaciones de Galileo, son exactamente iguales pero con un nuevo factor al que denominaremos con gamma, y que depende de la velocidad relativa con la que el sistema de referencia se mueve. A continuación veremos cómo determinar el valor de este nuevo factor.

Trans. directa

$$x = \gamma(x' + v \cdot t') \qquad x' = \gamma(x - v \cdot t)$$

Trans. inversa

Si expresamos x y x' como ct y ct'

$$c \cdot t = \gamma(c \cdot t' + v \cdot t') = \gamma(c + v)t' \qquad c \cdot t' = \gamma(c \cdot t + v \cdot t) = \gamma(c + v)t$$

$$t = \frac{c \cdot t'}{\gamma(c - v)}$$ Despejando t de la transformación directa

$$\frac{c \cdot c \cdot \cancel{t}'}{\gamma(c - v)} = \gamma(c + v) \cdot \cancel{t}'$$ Sustituyendo t en la transformación inversa

$$c^2 = \gamma^2(c + v)(c - v) = \gamma^2(c^2 - v^2)$$

$$1 = \gamma^2\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)$$

Obtenemos el valor de γ

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Cómo determinar el valor de gamma de las transformaciones de Lorentz

A partir de estas nuevas transformaciones para sistemas inerciales, Lorentz dedujo que cuando un cuerpo se mueve en la misma dirección que un movimiento se produce una contracción en su longitud, encontrando así la solución al experimento de Michelson-Morley. Las nuevas transformaciones tendrían la siguiente apariencia:

Transformación directa	Transformación inversa
$x = \gamma(x' + v_x \cdot t)$	$x' = \gamma(x - v_x \cdot t)$
$y = \gamma(y' + v_y \cdot t)$	$y' = \gamma(y - v_y \cdot t)$
$z = \gamma(z' + v_z \cdot t)$	$z' = \gamma(z - v_z \cdot t)$

Cuestionario:

1. ¿Qué entiendes por las Transformaciones de Galileo? en don de puedes aplicarlas?
2. Explica qué son las Transformaciones de Lorentz?
3. ¿Qué significa Conservación del momento relativista?

Debate 5. Relatividad - Transformaciones de Lorentz

- Parte 1
  https://www.youtube.com/watch?v=-ivXJu_cFv0

- Parte 2
  https://www.youtube.com/watch?v=PHa2T70rJmE
  https://www.youtube.com/watch?v=4Gaq0mx2hL4

Cuestionario:

1. **¿Qué opinas de la relatividad? ¿En qué te puede ayudar a entender la nanotecnología?**

Debate 6. Nanotecnología

Por definición, la Nanotecnología, es el estudio y desarrollo de sistemas en escala nanométrica, “nano” es un prefijo del Sistema Internacional de Unidades que viene del griego νάνος que significa enano, y corresponde a un factor 10^-9, que aplicado a las unidades de longitud, corresponde a una mil millonésima parte de un metro (10^-9 Metros) es decir 1 Nanómetro.

En esta escala se observan propiedades y fenómenos totalmente nuevos, que se rigen bajo las leyes de la Mecánica Cuántica, estas nuevas propiedades son las que los científicos aprovechan para crear nuevos materiales (nanomateriales) o dispositivos nanotecnológicos.

La Nanotecnología promete soluciones a múltiples problemas que enfrenta actualmente la humanidad, como los ambientales, energéticos, de salud (nanomedicina), y muchos otros, sin embargo estas nuevas tecnologías pueden conllevar a riesgos y peligros si son mal utilizadas.

Historia de la Nanotecnología

Uno de lo pioneros en el campo de la Nanotecnología es el Físico estadounidense Richard Feynman, que en el año 1959 en un congreso de la sociedad americana de Física en Calltech, pronunció el discurso “There’s Plenty of Room at the Bottom” (Hay mucho espacio ahí abajo) en el que describe un proceso que permitiría manipular átomos y moléculas en forma individual, a través de instrumentos de gran precisión, de esta forma se podrían diseñar y construir sistemas en la nanoescala, átomo por átomo, en este discurso Feynman también advierte que las propiedades de estos sistemas nanométricos, serían distintas a las presentes en la macroescala.

En 1981, el ingeniero norteamericano Eric Drexler, inspirado en el discurso de Feynman, publica en la revista Proceedings of the National Academy of Sciences, el artículo “Molecular engineering: An approach to the development of general capabilities for molecular manipulation” en donde describe con más detalle lo avanzado en años anteriores por Feynman. El término “Nanotecnología” fue aplicado por primera vez por Drexler en el año 1986, en su libro “Motores de la creación : la próxima era de la Nanotecnología” en la que describe una máquina nanotecnológica con capacidad de autoreplicarse, en este contexto propuso el término de “plaga gris”, para referirse a lo que sucedería si un nanobot autoreplicante fuera liberado en el ambiente.

Además de Drexler, el científico japonés Norio Taniguchi, utilizó por primera vez el término nano-tecnología en el año 1974, en la que define a la nano-tecnología como el procesamiento, separación y manipulación de materiales átomo por átomo.

Sintetizado por primera vez en 2015, este material basado en el boro es más fuerte y más flexible que su antecesor, además de ligero y muy reactivo. A pesar de que es difícil de crear y manejar, químicos, físicos y otros científicos ya están entusiasmados con sus posibles aplicaciones

Hasta hace poco, el grafeno era visto como un material prodigioso. Una lámina súper fuerte de átomos en forma de "rejilla", capaz de formar tubos, bolas y otras formas curiosas. Y como conduce electricidad, los científicos de materiales plantearon la posibilidad de una nueva era de procesamiento informático basado en el grafeno así como una nueva y lucrativa industria de chips de grafeno. Bajo esta fiebre, la Unión Europea invirtió 1.000 millones de euros para impulsar la industria basada en este material.

Pero los años pasan y la nueva era del grafeno sigue sin materializarse, lo que ha aumentado el interés por otros materiales bidimensionales. De todos ellos, el más impresionante es el borofeno: una única capa de átomos de boro capaz de formar varias estructuras cristalinas.

Lo que sorprende de este material es la extraordinaria gama de aplicaciones para las que parece adecuado. Los electroquímicos creen que el borofeno podría convertirse en el material del ánodo en una nueva generación de baterías de iones de litio más potentes. Los químicos están fascinados por sus capacidades catalíticas. Y los físicos están probando sus habilidades como sensor para detectar numerosos tipos de átomos y moléculas.

Ahora, el investigador de la Universidad de Xiamen (China) Zhi-Qiang Wang y varios colegas han revisado las propiedades más destacadas del borofeno y dónde se podrían aplicar.

La historia de este material es muy corta. Los físicos predijeron su existencia en la década de 1990 mediante simulaciones de ordenador que mostraban cómo los átomos de boro podían formar una monocapa. Pero esta exótica sustancia no se sintetizó hasta 2015 gracias a la deposición química de vapor. Se trata de un proceso en el que un gas caliente de átomos de boro se condensa en una superficie fría de plata pura.

La disposición regular de los átomos de plata fuerza a los átomos de boro a adoptar un patrón similar, cada uno de los cuales se une a otros seis átomos para crear una estructura hexagonal plana. Pero, una proporción significativa de átomos de boro se une solo con otros cuatro o cinco átomos dejando huecos en la estructura. El patrón de esos huecos es lo que da a los cristales de borofeno sus propiedades únicas.

Desde la síntesis del borofeno, los químicos han defendido sus propiedades con entusiasmo. El borofeno resulta más fuerte que el grafeno y más flexible. Es un buen conductor tanto de electricidad como de calor, y también funciona como superconductor. Estas propiedades varían según la orientación del material y la disposición de los huecos, lo que lo convierte en un compuesto "sintonizable", al menos en principio. Esa es una de las razones por las que los químicos están tan ilusionados.

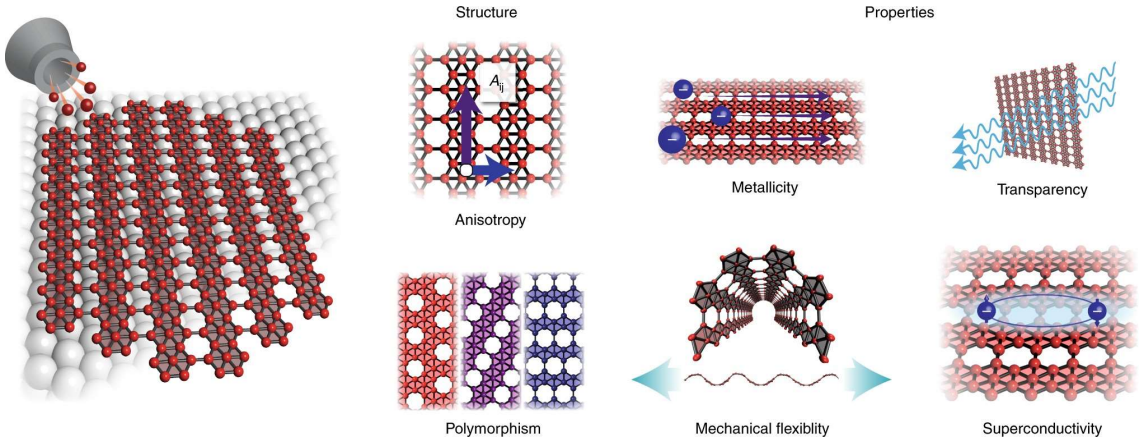
El borofeno también es ligero y bastante reactivo, posicionándolo como buen candidato para almacenar iones metálicos en baterías. "El borofeno es un prometedor material de ánodo para las baterías de iones de litio, sodio y magnesio debido a sus altas capacidades teóricas específicas, su excelente conductividad electrónica y sus excelentes propiedades de transporte de iones", afirman Wang y sus compañeros.

Los átomos de hidrógeno también se adhieren fácilmente a su estructura, y esta propiedad de adsorción, combinada con la enorme superficie de las capas atómicas, hace del borofeno un material con potencial para almacenar hidrógeno. Los estudios teóricos sugieren que el borofeno podría almacenar más del 15 % de su peso en hidrógeno, superando significativamente a otros materiales.

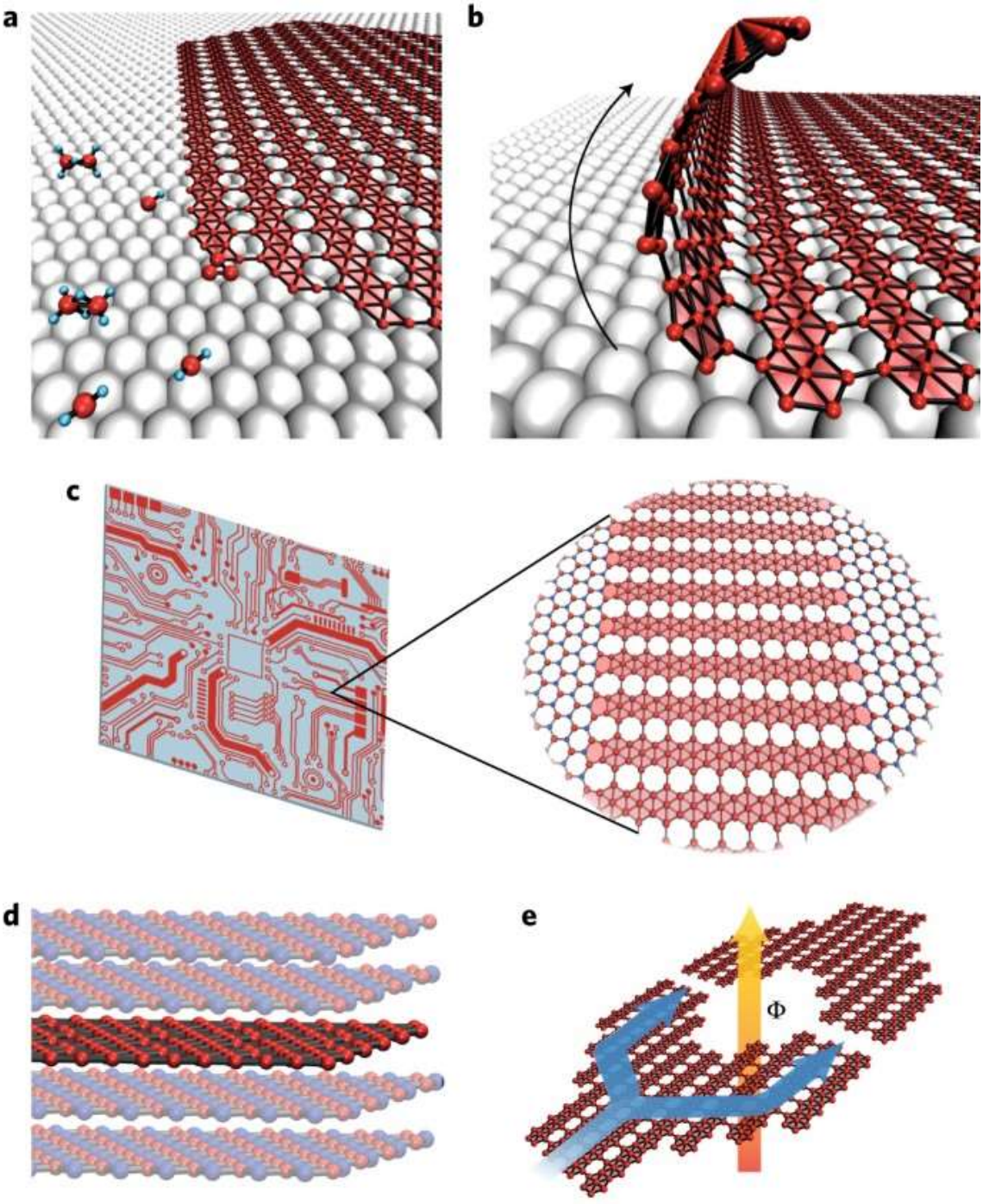
Además se destaca la capacidad del borofeno para catalizar la descomposición del hidrógeno molecular en iones de hidrógeno, y del agua en iones de hidrógeno y oxígeno. "Se han encontrado excelentes resultados catalíticos del borofeno en la reacción de evolución de hidrógeno, en la reacción de reducción de oxígeno, en la reacción de evolución de oxígeno y en la reacción de electrorreducción de CO_2", explica el equipo. Eso podría marcar el comienzo de una nueva era de ciclos de energía basados en el agua.

No obstante, los químicos tienen mucho trabajo por hacer antes de que el borofeno se masifique. Para empezar, todavía tienen que encontrar una forma de producir borofeno en grandes cantidades. Y la reactividad del material significa que es vulnerable a la oxidación, por lo que debe ser protegido cuidadosamente. Ambos factores hacen que el borofeno resulte caro de fabricar y difícil de manejar. Así que queda mucho trabajo por delante. Pero los químicos tienen mucha fe. El borofeno puede convertirse en el próximo material maravilloso que llega a este mundo.

A la oleada de nuevos materiales como el grafeno, fosforeno, siliceno, germaneno … debemos incorporar el borofeno, un nuevo material bidimensional, más fuerte y flexible que el grafeno, que por su afinidad con el boro, podrá ser utilizado en muchas aplicaciones.



Obtenido por evaporación y deposición de boro en un sustrato de plata, Ag(111, el borofeno tiene una estructura de átomos de boro hexagonal (similar a la de los átomos de carbono en el grafeno), pero con un átomo de boro adicional en el centro de cada hexágono.



Los expertos están emocionados por sus posibles aplicaciones, ya que es un buen conductor de electricidad, calor y también es superconductor. Pero sobre todo, porque estas propiedades son diferentes según la orientación del material y la disposición de las vacantes, lo que le otorga una gran flexibilidad en sus posibles usos.

Los átomos de hidrógeno también se adhieren fácilmente a la estructura de una sola capa del borofeno, y esta propiedad combinada con el enorme área de superficie de

las capas atómicas, hace del borofeno un material prometedor para el almacenamiento de hidrógeno. Los estudios teóricos sugieren que el borofeno podría almacenar más del 15% de su peso en hidrógeno, superando significativamente a otros materiales.

Cabe destacar, la capacidad del borofeno para catalizar la descomposición del hidrógeno molecular en iones de hidrógeno, y el agua en iones de hidrógeno y oxígeno. Eso podría marcar el comienzo de una nueva era de ciclos de energía basados en el agua.

Cuestionario:

1.- En mecánica, a menudo se usa el modelo de un cuerpo perfectamente rígido para modelar y determinar el movimiento de objetos físicos. Explique cómo este modelo contradice la teoría de la relatividad especial de Einstein.

2.- Explica detalladamente la Relación cantidad de movimiento-energía

3.- ¿Qué significa Cantidad de movimiento?

4.- ¿Cómo explicas la Invariancia de Lorentz de los intervalos espacio-tiempo?

5.- ¿Qué es una Transformación de Lorentz?

Debate 7. Relatividad

Hola a todos, la clase de hoy es sobre la teoría de la Relatividad.

Anexo dos videos que quiero que vean

Estaremos en línea.
Hacer un resumen de los dos videos para mañana miercoles y para la siguiente semana martes pasar a su cuaderno la presentación que daremos en la sala del chat junto con los problemas a resolver.

1. https://www.youtube.com/watch?v=RTlixJv7gWo
2. https://www.youtube.com/watch?v=vG1vXgDvvqY

Cuestionario:

1.- Defina con sus palabras la teoría de la relatividad

2.- ¿Qué significa exactamente en física un marco de referencia?

3.- ¿Qué son las transformaciones de Lorentz?

Debate 8. Efecto Fotoeléctrico

Efecto fotoeléctrico

El efecto fotoeléctrico consiste en la emisión de electrones por un material al incidir sobre él una radiación electromagnética (luz visible o ultravioleta, en general). A veces se incluyen en el término otros tipos de interacción entre la luz y la materia:

Fotoconductividad: Es el aumento de la conductividad eléctrica de la materia o en diodos provocada por la luz. Descubierta por Willoughby Smith en el selenio hacia la mitad del siglo XIX.

Efecto fotovoltaico: Transformación parcial de la energía lumínica en energía eléctrica. La primera célula solar fue fabricada por Charles Frittsen 1884. Estaba formada por selenio recubierto de una fina capa de oro.

El efecto fotoeléctrico fue descubierto y descrito por Heinrich Hertz, en 1887, al observar que el arco que salta entre dos electrodos conectados a alta tensión alcanza distancias mayores cuando se ilumina con luz ultravioleta que cuando se deja en la oscuridad. La explicación teórica fue hecha por Albert Einstein, quien publicó en 1905 el revolucionario artículo Heurística de la generación y conversión de la luz, basando su formulación de la fotoelectricidad en una extensión del trabajo sobre los cuantos de Max Planck. Más tarde Robert Andrews Millikan pasó diez años experimentando para demostrar que la teoría de Einstein no era correcta, para finalmente concluir que sí lo era. Eso permitió que Einstein y Millikan fueran galardonados con Premios Nobel en 1921 y 1923, respectivamente.

Se podría decir que el efecto fotoeléctrico es lo opuesto a los rayos X, ya que el efecto fotoeléctrico indica que los fotones pueden transferir energía a los electrones. Los rayos X (no se sabía la naturaleza de su radiación, de ahí la incógnita "X") son la transformación en un fotón de toda o parte de la energía cinética de un electrón en movimiento. Esto se descubrió casualmente antes de que se dieran a conocer los trabajos de Planck y Einstein (aunque no se comprendió entonces).

Los fotones tienen una energía característica determinada por la frecuencia de onda de la luz. Si un átomo absorbe energía de un fotón que tiene más energía que la necesaria para expulsar un electrón del material y además posee una trayectoria dirigida hacia la superficie, entonces el electrón puede ser expulsado del material. Si la energía del fotón es demasiado pequeña, el electrón es incapaz de escapar de la superficie del material. Los cambios en la intensidad de la luz no modifican la energía de sus fotones, tan solo el número de electrones que pueden escapar de la superficie sobre la que incide y por tanto la energía de los electrones emitidos no depende de la intensidad de la radiación que le llega, sino de su frecuencia. Si el fotón es absorbido, parte de la energía se utiliza para liberarlo del átomo y el resto contribuye a dotar de energía cinética a la partícula libre.

En principio, todos los electrones son susceptibles de ser emitidos por efecto fotoeléctrico. En realidad los que más salen son los que necesitan menos energía para ser expulsados y, de ellos, los más numerosos.

En un aislante (dieléctrico), los electrones más energéticos se encuentran en la banda de valencia. En un metal, los electrones más energéticos están en la banda de conducción. En un semiconductor de tipo N, son los electrones de la banda de conducción los que son más energéticos. En un semiconductor de tipo P también, pero hay muy pocos en la banda de conducción. Así que en ese tipo de semiconductor hay que tener en cuenta los electrones de la banda de valencia.

A la temperatura ambiente, los electrones más energéticos se encuentran cerca del nivel de Fermi (salvo en los semiconductores intrínsecos en los cuales no hay electrones cerca del nivel de Fermi). La energía que hay que dar a un electrón para llevarlo desde el nivel de Fermi hasta el exterior del material se llama función de trabajo, y la frecuencia mínima necesaria, de radiación incidente, para sacar un electrón del metal, recibe el nombre de frecuencia umbral. El valor de esa energía es muy variable y depende del material, estado cristalino y, sobre todo, de las últimas capas atómicas que recubren la superficie del material. Los metales alcalinos (sodio, calcio, cesio, etc.), presentan las más bajas funciones de trabajo. Aún es necesario que las superficies estén limpias a nivel atómico. Una de las mayores dificultades en los experimentos de Millikan era que había que fabricar las superficies de metal en el vacío.

Explicación

Los fotones del rayo de luz tienen una energía característica determinada por la frecuencia de la luz. En el proceso de fotoemisión, si un electrón absorbe la energía de un fotón y este último tiene más energía que la función de trabajo, el electrón es arrancado del material. Si la energía del fotón es demasiado baja, el electrón no puede escapar de la superficie del material.

Al aumentar la intensidad del haz no cambia la energía de los fotones constituyentes, solo cambia el número de fotones. En consecuencia, la energía de los electrones emitidos no depende de la intensidad de la luz, sino de la energía de los fotones.

Los electrones pueden absorber energía de los fotones cuando son irradiados, pero siguiendo un principio de "todo o nada". Toda la energía de un fotón debe ser absorbida y utilizada para liberar un electrón de un enlace atómico, o si no la energía es re-emitida. Si la energía del fotón es absorbida, una parte libera al electrón del átomo y el resto contribuye a la energía cinética del electrón como una partícula libre.

Einstein no se proponía estudiar las causas del efecto en el que los electrones de ciertos metales, debido a una radiación luminosa, podían abandonar el metal con energía cinética. Intentaba explicar el comportamiento de la radiación, que obedecía a la intensidad de la radiación incidente, al conocerse la cantidad de electrones que abandonaba el metal, y a la frecuencia de la misma, que era proporcional a la energía que impulsaba a dichas partículas.

Leyes de la emisión fotoeléctrica

Para un metal y una frecuencia de radiación incidente dados, la cantidad de fotoelectrones emitidos es directamente proporcional a la intensidad de luz incidente.

Para cada metal dado, existe una cierta frecuencia mínima de radiación incidente debajo de la cual ningún fotoelectrón puede ser emitido. Esta frecuencia se llama frecuencia de corte, también conocida como "Frecuencia Umbral".

Por encima de la frecuencia de corte, la energía cinética máxima del fotoelectrón emitido es independiente de la intensidad de la luz incidente, pero depende de la frecuencia de la luz incidente.

La emisión del fotoelectrón se realiza instantáneamente, independientemente de la intensidad de la luz incidente. Este hecho se contrapone a la teoría Clásica: la Física Clásica esperaría que existiese un cierto retraso entre la absorción de energía y la emisión del electrón, inferior a un nanosegundo.

Formulación matemática

Para analizar el efecto fotoeléctrico cuantitativamente utilizando el método derivado por Einstein es necesario plantear las siguientes ecuaciones:

Energía de un fotón absorbido = Energía necesaria para liberar 1 electron + energia cinética del electrón emitido.

Algebraicamente:

$$hf = hf_0 + \frac{1}{2}mv_m{}^2$$

que puede también escribirse como

$$hf = \phi + E_k$$

donde h es la constante de Planck, f0 es la frecuencia de corte o frecuencia mínima de los fotones para que tenga lugar el efecto fotoeléctrico, Φ es la función de trabajo, o mínima energía necesaria para llevar un electrón del nivel de Fermi al exterior del material y Ek es la máxima energía cinética de los electrones que se observa experimentalmente.

Nota: Si la energía del fotón (hf) no es mayor que la función de trabajo (Φ), ningún electrón será emitido. Si los fotones de la radiación que inciden sobre el metal tienen una menor energía que la de función de trabajo, los electrones del material no obtienen suficiente energía como para emitirse de la superficie metálica.

En algunos materiales esta ecuación describe el comportamiento del efecto fotoeléctrico de manera tan solo aproximada. Esto es así porque el estado de las superficies no es perfecto (contaminación no uniforme de la superficie externa).

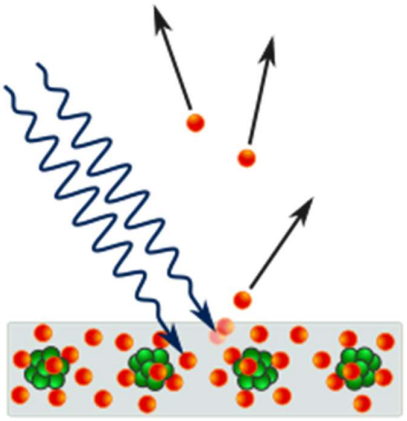
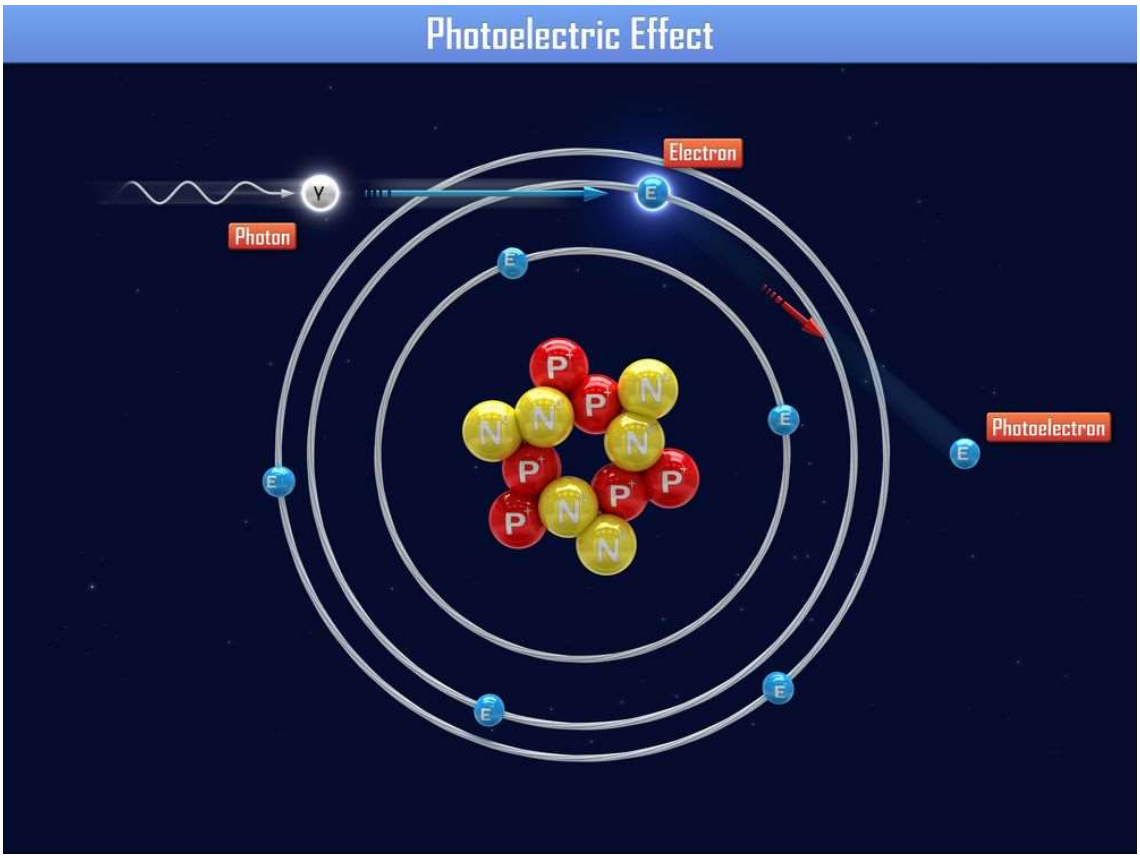


Diagrama ilustrando la emisión de electrones (en rojo) de una placa metálica al recibir suficiente energía transferida desde los fotones incidentes (líneas onduladas).

Cuantos de luz de Einstein

En 1905, el mismo año que formuló su teoría de la relatividad especial, Albert Einstein propuso una descripción matemática de este fenómeno que parecía funcionar correctamente y en la que la emisión de electrones era producida por la absorción de cuantos de luz que más tarde serían llamados fotones. En un artículo titulado "Un punto de vista heurístico sobre la producción y transformación de la luz" mostró cómo la idea de que partículas discretas de luz podían generar el efecto fotoeléctrico y también mostró la presencia de una frecuencia característica para cada material por debajo de la cual no se producía ningún efecto. Por esta explicación del efecto fotoeléctrico Einstein recibiría el Premio Nobel de Física en 1921.



Según las investigaciones de Einstein, la energía con que los electrones escapaban del cátodo iluminado aumentaba linealmente con la frecuencia de la luz incidente, siendo independiente de la intensidad de iluminación. Sorprendentemente este aspecto no se había observado en experiencias anteriores sobre el efecto fotoeléctrico. La demostración experimental de este aspecto la llevó a cabo en 1915 el físico estadounidense Robert Andrews Millikan.

Dualidad onda-corpúsculo

El efecto fotoeléctrico fue uno de los primeros efectos físicos que puso de manifiesto la dualidad onda-corpúsculo característica de la mecánica cuántica. La luz se comporta como ondas pudiendo producir interferencias y difracción como en el experimento de la doble rendija de Thomas Young, pero intercambia energía de forma discreta en paquetes de energía, fotones, cuya energía depende de la frecuencia de la radiación electromagnética. Las ideas clásicas sobre la absorción de radiación electromagnética por un electrón sugerían que la energía es absorbida de manera continua. Este tipo de explicaciones se encontraban en libros clásicos como el libro de Millikan sobre los electrones o el escrito por Compton y Allison sobre la teoría y experimentación con rayos X. Estas ideas fueron rápidamente reemplazadas tras la explicación cuántica de Albert Einstein.

Efecto fotoeléctrico en la actualidad

El efecto fotoeléctrico es la base de la producción de energía solar fotovoltaica. Este principio se utiliza también para la fabricación de células utilizadas en los detectores de llama de las calderas de las grandes centrales termoeléctricas, así como para los sensores utilizados en las cámaras digitales. También se utiliza en diodos fotosensibles tales como los que se utilizan en las células fotovoltaicas y en electroscopios o electrómetros. En la actualidad los materiales fotosensibles más utilizados son, aparte de los derivados del cobre —ahora en menor uso—, el silicio, que produce corrientes eléctricas mayores.

El efecto fotoeléctrico también se manifiesta en cuerpos expuestos a la luz solar de forma prolongada. Por ejemplo, las partículas de polvo de la superficie lunar adquieren carga positiva debido al impacto de fotones. Las partículas cargadas se repelen mutuamente elevándose de la superficie y formando una tenue atmósfera. Los satélites espaciales también adquieren carga eléctrica positiva en sus superficies iluminadas y negativa en las regiones oscurecidas, por lo que es necesario tener en cuenta estos efectos de acumulación de carga en su diseño.

De sesiones anteriores el tema fue la relatividad:

ted.com/talks/miguel_alcubierre_como_podriamos_viajar_mas_rapido_que_la_velocidad_de_la_luz/transcript?language=es

es.wikipedia.org/wiki/Espacio-tiempo_de_Minkowski

En mecánica cuántica, una función de onda $\psi(\mathbf{x}, t)$ es una forma de representar el estado físico de un sistema de partículas. Usualmente es una función compleja, de cuadrado integrable y univaluada de las coordenadas espaciales de cada una de las partículas. Las propiedades mencionadas de la función de onda permiten interpretarla como una función de cuadrado integrable. La ecuación de Schrödinger

proporciona una ecuación determinista para explicar la evolución temporalde la función de onda y, por tanto, del estado físico del sistema en el intervalo comprendido entre dos medidas (cuando se hace una medida, de acuerdo con el postulado IV, la evolución no es determinista).

Históricamente el concepto función de onda fue desarrollado en el marco de la primera física cuántica, donde se interpretaba que las partículas podían ser representadas mediante una onda física que se propaga en el espacio. En la formulación moderna, la función de onda se interpreta como un objeto mucho más abstracto, que representa un elemento de un cierto espacio de Hilbert de dimensión infinita que agrupa a los posibles estados del sistema.

Formulación original de Schrödinger-De Broglie

En 1923 De Broglie propuso la llamada hipótesis de De Broglie por la que a cualquier partícula podía asignársele un paquete de ondas materiales o superposición de ondas de frecuencia y longitud de onda asociada con el momento lineal y la energía:

$$\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} = \hbar\mathbf{k} \qquad E_k = h\nu = \hbar\omega$$

donde $\mathbf{p},\ E_k$ son el momento lineal y la energía cinética de la partícula, y $\mathbf{k}, \omega$ son el vector número de onda y la frecuencia angular. Cuando se consideran partículas macroscópicas muy localizadas, el paquete de ondas se restringe casi por completo a la región del espacio ocupada por la partícula y, en ese caso, la velocidad de movimiento de la partícula no coincide con la velocidad de fase de la onda sino con la velocidad de grupo del paquete:

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\partial E_k}{\partial p} = \frac{\partial E_k(p)}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

donde $E_k(p) = p^2/2m$. Si en lugar de las expresiones clásicas del momento lineal y la energía se usan las expresiones relativistas, lo cual da una descripción más precisa para partículas rápidas, un cálculo algo más largo, basado en la velocidad de grupo, lleva a la misma conclusión.

La fórmula de De Broglie encontró confirmación experimental en 1927 en un experimento que probó que la ley de Bragg, inicialmente formulada para rayos X y radiación de alta frecuencia, era también válida para electrones lentos si se usaba como longitud de onda la longitud postulada por De Broglie. Esos hechos llevaron a los físicos a tratar de formular una ecuación de ondas cuántica que en el límite clásico macroscópico se redujera a las ecuaciones de movimiento clásicas o leyes de Newton. Dicha ecuación ondulatoria había sido formulada por Erwin Schrödinger en 1925 y es la celebrada Ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x},t)+V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x},t)=i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{x},t)}{\partial t}$$

donde $\psi(\mathbf{x},t)$ Se interpretó originalmente como un campo físico o campo de materia que por razones históricas se llamó función de onda y fue el precedente histórico del moderno concepto de función de onda.

El concepto actual de función de onda es causa de debate en la Física actual, sobre todo en lo que respecta a la realidad objetiva e intrínseca de dicha función de onda. Matemáticamente, la implicación del cuadrado de la función de onda es la amplitud de la probabilidad de presencia de materia. Esta interpretación, introducida por Max Born, le valió la concesión del premio Nobel de física en 1954.

- **Física clásica:**
  https://www.geoenciclopedia.com/las-9-ramas-de-la-fisica-clasica-y-moderna/
- **Luz; Onda o partícula.**
  youtube.com/watch?v=Bi91Jyv1_lE
- **Inicios de la Física Cuántica:**
  youtube.com/watch?v=Bi91Jyv1_lE
- **Radiación de Cuerpo negro:**

- **Catástrofe ultravioleta:**
  youtube.com/watch?v=tqoum6xr-FA
- **Ley de Rayleigh-jeans**
  es.wikipedia.org/wiki/Ley_de_Rayleigh-Jeans
- **Ley de wien**
  https://es.wikipedia.org/wiki/Ley_de_desplazamiento_de_Wien
- **Efecto fotoeléctrico**:
  youtube.com/watch?v=5CLj9uJPQKg
  youtube.com/watch?v=gH3QtgqJqjw
  youtube.com/watch?v=fQ7eZOvhf0I

Cuestionario:

1.- ¿Qué entiendes por Catastrofe ultravioleta?

2.- ¿Qué es el efecto fotoeléctrico?

3.- ¿Qué es el experimento de Young, qué explica?

4.- Explicar las Leyes de la emisión fotoeléctrica

Debate 9. Práctica de Efecto Fotoeléctrico

Revisar este link:
https://phet.colorado.edu/sims/cheerpj/photoelectric/latest/photoelectric.html?simulation=photoelectric

Efectuar la práctica según el formato indicado.
Variar, Intensidad, longitud de onda y voltaje.

- Grafeno: El Material del Futuro
  https://www.youtube.com/watch?v=zn4B5nBAhJA
  https://www.youtube.com/watch?v=7xkJKz9a-dg
- Efecto Hall
  https://www.youtube.com/watch?v=odDjDZ6lq4o

EFECTO HALL

Se conoce como efecto Hall a la aparición de un campo eléctrico por separación de cargas en el interior de un conductor por el que circula una corriente en presencia de un campo magnético con componente perpendicular al movimiento de las cargas. Este campo eléctrico (campo Hall) es perpendicular al movimiento de las cargas y a la componente perpendicular del campo magnético aplicado. Lleva el nombre de su primer modelador, el físico estadounidense Edwin Herbert Hall (1855-1938).

En épocas contemporáneas (1985), el físico alemán Klaus von Klitzing y sus colaboradores descubrieron el hoy conocido como efecto Hall cuántico, lo que les valió la obtención del premio Nobel de Física en 1985. En 1998 se otorgó un nuevo premio Nobel de Física a los profesores Laughlin, Strömer y Tsui por el descubrimiento de un nuevo fluido cuántico con excitaciones de carga fraccionarias. Este nuevo efecto ha traído grandes problemas a los físicos teóricos y actualmente constituye uno de los campos de investigación de mayor interés y actualidad en toda la física del estado sólido.

Explicación cualitativa del efecto Hall clásico

Cuando por un material conductor o semiconductor circula una corriente eléctrica, y estando este mismo material en el seno de un campo magnético, se comprueba que aparece una fuerza magnética en los portadores de carga que los reagrupa dentro del material; esto es, los portadores de carga se desvían y agrupan a un lado del material conductor o semiconductor, apareciendo así una variación de potencial en el conductor, lo cual origina un campo eléctrico perpendicular al campo magnético y al propio campo eléctrico generado por la batería (Fm). Este campo eléctrico es el denominado campo Hall (EH), y ligada a él aparece la tensión Hall, que se puede medir mediante el voltímetro de la figura.

En el caso de la figura, se tiene una barra de un material desconocido y se quiere saber cuáles son sus portadores de carga. Para ello, mediante una batería se hace circular por la barra una corriente eléctrica. Una vez hecho esto, se introduce la barra en el seno de un campo magnético uniforme y perpendicular a la tableta.

Aparecerá entonces una fuerza magnética sobre los portadores de carga, que tenderá a agruparlos a un lado de la barra, apareciendo de este modo una tensión Hall y un campo eléctrico Hall entre ambos lados de la barra. Dependiendo de si la lectura del voltímetro es positiva o negativa, y conociendo la dirección del campo magnético y del campo eléctrico originado por la batería, se puede deducir si los portadores de carga de la barra de material desconocido son las cargas positivas o las negativas.

En la figura de al lado se ve cómo el material tiene dos zonas: la de la izquierda y la de la derecha. En una zona, los portadores son huecos y en la otra electrones.

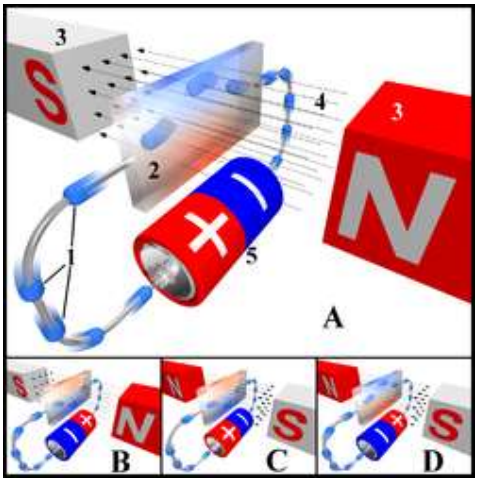


Diagrama del efecto Hall, mostrando el flujo de electrones (en vez de la corriente convencional).

1. Electrones
2. Sensor o sonda Hall
3. Imanes
4. Campo magnético

5. Fuente de energía

Descripción:
En la imagen A, una carga negativa aparece en el borde superior del sensor Hall (simbolizada con el color azul), y una positiva en el borde inferior (color rojo). En B y C, el campo eléctrico o el magnético están invertidos, causando que la polaridad se invierta. Invertir tanto la corriente como el campo magnético (imagen D) causa que la sonda asuma de nuevo una carga negativa en la esquina superior.

Explicación cuantitativa del efecto Hall clásico

Sea el material por el que circula la corriente con una velocidad v al que se le aplica un campo magnético B. Al aparecer una fuerza magnética , los portadores de carga se agrupan en una región del material, ocasionando la aparición de una tensión y por lo tanto de un campo eléctrico E en la misma dirección. Este campo ocasiona a su vez la aparición de una fuerza eléctrica Fe de dirección contraria a Fm.

$$F_e = F_m \Rightarrow q \cdot E = q \cdot v \cdot B \Rightarrow E = v \cdot B \Rightarrow V_H/d = v \cdot B \Rightarrow V_H = v \cdot B \cdot d$$

Cuestionario:

1.- ¿Qué es el espectro electromagnético?

2.- ¿Qué significa para ti la variación del blanco en el experimento?

3.- ¿Qué importancia tiene la variación del voltaje en la práctica?

4.- ¿Cómo relacionas la energía de los fotones con la frecuencia de la luz?

Debate 10. Dispersión de Compton

El efecto Compton (o dispersión Compton) consiste en el aumento de la longitud de onda de un fotón cuando choca con un electrón libre y pierde parte de su energía. La frecuencia o la longitud de onda de la radiación dispersada depende únicamente del ángulo de dispersión.

La variación de longitud de onda de los fotones dispersados, $\Delta\lambda$, puede calcularse a través de la relación de Compton:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}\left(1 - \cos\theta\right),$$

- h es la constante de Planck,

- m_e es la masa del electrón,
- c es la velocidad de la luz.
- θ el ángulo entre los fotones incidentes y dispersados.

Esta expresión proviene del análisis de la interacción como si fuera una colisión elástica y su deducción requiere únicamente la utilización de los principios de conservación de energía y momento. La cantidad h/me*c = 0.0243 Å, se denomina longitud de onda de Compton. Para los fotones dispersados a 90°, la longitud de onda de los rayos X dispersados es justamente 0.0243 Å mayor que la línea de emisión primaria.

La deducción de la expresión para △λ (llamada a veces corrimiento de Compton) puede hacerse considerando la naturaleza corpuscular de la radiación y las relaciones de la mecánica relativista. Consideremos un fotón de longitud de onda λ y momentum h/λ
dirigiéndose hacia un electrón en reposo (masa en reposo del electrón m_e). La teoría de la relatividad especial impone la conservación del cuadrimomento $p^\mu = (E/c, \vec{p})$. Si λ' es la longitud de onda del fotón dispersado y $\vec{p}$ es el momentum del electrón dispersado se obtiene:

$$\frac{h}{\lambda'} \sin\theta = p \sin\phi$$

$$\frac{h}{\lambda} = p \cos\phi + \frac{h}{\lambda'} \cos\theta$$

donde θ y Φ son, respectivamente, los ángulos de dispersión del fotón y del electrón (medidos respecto de la dirección del fotón incidente). La primera de las ecuaciones anteriores asegura la conservación de la componente del momento perpendicular a la dirección incidente, la segunda hace lo mismo para la dirección paralela. La conservación de la energía da:

$$\frac{hc}{\lambda} + m_e c^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \sqrt{m_e^2 c^4 + c^2 p^2}$$

Lo que sigue es un trabajo de álgebra elemental. De las ecuaciones de conservación del momentum es fácil eliminar Φ para obtener:

$$p^2 = h^2 \left(\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{\lambda'^2} - \frac{2}{\lambda \lambda'} \cos\theta \right)$$

En la expresión para la conservación de la energía se hace:

$$\left[hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) + m_e c^2 \right]^2 = m_e^2 c^4 + c^2 p^2$$

- Dispersión de Compton

https://www.youtube.com/watch?v=fQ7eZOvhf0I
- Revolución de materiales cuánticos
  https://www.youtube.com/watch?v=zn4B5nBAhJA
- Pozos cuánticos
  https://www.youtube.com/watch?v=UqlFLIj0j2A

Tarea:
LOS PROBLEMAS RESUELTOS
Pasarlos en limpio a su cuaderno, Todos los del capitulo 34, son 85 problemas. Comenzaremos a ver la resolución de ellos,están resueltos paso a paso.

Cuestionario:

1.- ¿Qué es el efecto Compton? ¿Cómo impacta en la Nanotecnología?

2.- ¿Qué es la constante de Planck?

3.- ¿Cómo calculamos la masa del electrón?

4.- ¿Cómo podemos medir la velocidad de la luz?

5.- En el efecto Compton, ¿cómo medimos el ángulo entre los fotones incidentes y dispersados?

Debate 11. Problemas Efecto Fotoeléctrico-Compton

- ¿QUÉ ES EL EFECTO COMPTON?
  https://www.youtube.com/watch?v=1ts985f-Bu0 6:20

- El efecto Compton
  https://www.youtube.com/watch?v=fQ7eZOvhf0I&t=12s 4:10

Dispersión de Compton

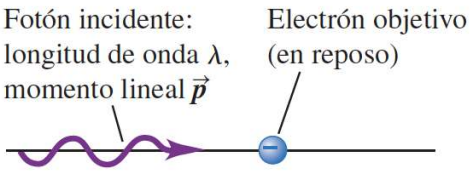
Vamos a ver qué predicen el modelo ondulatorio de Maxwell y el modelo del fotón de Einstein cuando la luz es dispersada por un solo electrón, por ejemplo, un electrón en un átomo.

Predicción del modelo de onda: En la descripción de onda, la dispersión sería un proceso de absorción y re-radiación. Parte de la energía de la onda de luz sería absorbida por el electrón, que oscila en respuesta al campo eléctrico oscilante de la onda. El electrón oscilante actuaría como una antena en miniatura (véase la sección 32.1), al re-irradiar su energía adquirida en forma de ondas dispersas en diferentes direcciones. La frecuencia a la que oscilan los electrones sería la misma que la frecuencia de la luz incidente, y la luz re-irradiada tendría la misma frecuencia que las oscilaciones del electrón. Así, en el modelo de onda, la luz dispersada y la luz incidente tienen la misma frecuencia e igual longitud de onda.

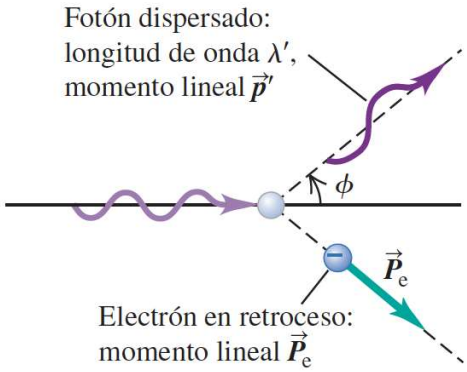
Predicción del modelo de fotón: En el modelo de fotón nos imaginamos el proceso de dispersión como una colisión de dos partículas: el fotón incidente y un electrón que se encuentra inicialmente en reposo (figura 38.10a). El fotón incidente cede parte de su energía y su momento lineal al electrón, que retrocede como consecuencia de este impacto. El fotón disperso que queda puede volar en una variedad de ángulos con respecto a la dirección incidente, pero tiene menos energía y menos momento lineal que el fotón incidente (figura 38.10b). La energía y el momento lineal de un fotón están dados por $p = hf/c = h/\lambda$. Por lo tanto, en el modelo de fotón, la luz dispersada tiene una frecuencia f más baja y más larga de longitud de onda l de la luz incidente.

38.10 El modelo de fotón de luz dispersada por un electrón.

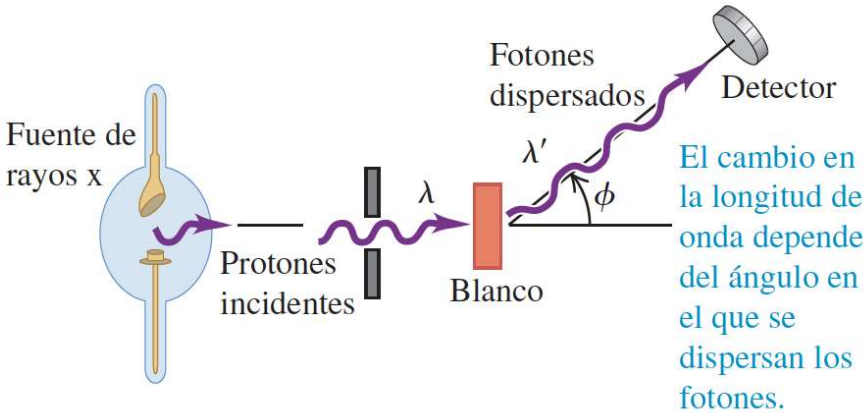
a) Antes de colisión: el electrón objetivo está en reposo.



b) Después de la colisión: el ángulo entre las direcciones del fotón disperso y el fotón incidente es ϕ.



38.11 Un experimento de efecto Compton.



El cambio en la longitud de onda depende del ángulo en el que se dispersan los fotones.

En 1922 el físico estadounidense Arthur H. Compton realizó el experimento definitivo que puso a prueba las predicciones de los modelos de ondas y del fotón. En su experimento, Compton apuntó un haz de rayos x en un objetivo sólido y midió la longitud de onda de la radiación dispersada por el objetivo (figura 38.11). Se descubrió que algo de la radiación dispersada tiene menor frecuencia (mayor longitud de onda) que la radiación incidente, y que el cambio en la longitud de onda depende del ángulo a través del cual se dispersa la radiación. Esto es precisamente lo que predice el modelo de fotón de la luz dispersada por los electrones en el objetivo, un proceso que ahora se llama **dispersión de Compton**.

Específicamente, si la radiación dispersada emerge en un ángulo ϕ con respecto a la dirección incidente, como se muestra en la figura 38.11, y si λ y λ' son las longitudes de onda de la radiación incidente y dispersada, respectivamente, Compton encontró que

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\phi) \qquad \text{(dispersión de Compton)} \qquad (38.7)$$

donde m es la masa en reposo del electrón. En otras palabras, λ' es mayor que λ. La cantidad h/mc que aparece en la ecuación (38.7) tiene unidades de longitud. Su valor numérico es

$$\frac{h}{mc} = \frac{6.626 \times 10^{-34}\ \text{J}\cdot\text{s}}{(9.109 \times 10^{-31}\ \text{kg})(2.998 \times 10^{8}\ \text{m/s})} = 2.426 \times 10^{-12}\ \text{m}$$

Ejemplo 38.5 Dispersión de Compton

Se utilizan fotones de rayos x de 0.124 nm en un experimento de dispersión de Compton. *a*) ¿A qué ángulo la longitud de onda de los rayos x dispersados es 1.0% mayor que la de los rayos x incidentes? *b*) ¿A qué ángulo es 0.050% mayor?

SOLUCIÓN

IDENTIFICAR y PLANTEAR: Usaremos la relación entre el ángulo de dispersión y el corrimiento de longitud de onda en el efecto Compton. En cada caso, nuestra incógnita es el ángulo ϕ (véase la figura 38.10*b*). Despejamos ϕ usando la ecuación (38.7).

EJECUTAR: *a*) En la ecuación (38.7) queremos que $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ sea el 1.0% de 0.124 nm, por lo que $\Delta\lambda = 0.00124\ \text{nm} = 1.24 \times 10^{-12}$ m. Usando el valor $h/mc = 2.426 \times 10^{-12}$ m, encontramos

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\phi)$$

$$\cos\phi = 1 - \frac{\Delta\lambda}{h/mc} = 1 - \frac{1.24 \times 10^{-12}\ \text{m}}{2.426 \times 10^{-12}\ \text{m}} = 0.4889$$

$$\phi = 60.7°$$

b) Para que $\Delta\lambda$ sea 0.050% de 0.124 nm, es decir, 6.2×10^{-14} m,

$$\cos\phi = 1 - \frac{6.2 \times 10^{-14}\ \text{m}}{2.426 \times 10^{-12}\ \text{m}} = 0.9744$$

$$\phi = 13.0°$$

EVALUAR: Nuestros resultados muestran que los pequeños ángulos de dispersión dan pequeños corrimientos de longitud de onda. Así, en una colisión rasante del fotón, la pérdida de energía y la energía de retroceso de electrones son más pequeñas que cuando el ángulo de dispersión es más grande. Esto es justo lo que se podría esperar para una colisión elástica, ya sea entre un fotón y un electrón o entre dos bolas de billar.

Cuestionario:

1.- ¿De qué manera se parecen los fotones a otras partículas, tales como electrones? ¿Cómo se diferencian? ¿Los fotones tienen masa? ¿Tienen carga eléctrica? ¿Se pueden acelerar? ¿Qué propiedades mecánicas tienen?

2.- Existe una cierta probabilidad de que un electrón pueda absorber al mismo tiempo dos fotones idénticos de un láser de alta intensidad. ¿Cómo afecta esto a la frecuencia de umbral ? Explique su respuesta.

3.- De acuerdo con el modelo de fotón, la luz porta su energía en paquetes llamados cuantos o fotones. ¿Por qué entonces no vemos una serie de destellos cuando nos fijamos en los objetos?

4.- ¿Es de esperar que los efectos debidos a la naturaleza de fotones de la luz generalmente sean más importantes en el extremo de baja frecuencia del espectro electromagnético (ondas de radio) o en el final de la alta frecuencia (rayos x y rayos gamma)? ¿Por qué?

5.- Durante el efecto fotoeléctrico, la luz saca electrones de los metales. Entonces, ¿por qué los metales que hay en su casa no pierden sus electrones cuando se encienden las luces?

6.- La mayoría de las películas fotográficas de blanco y negro (excepto algunas de aplicación especial) son menos sensibles a la luz roja que a la luz azul, y casi no tienen sensibilidad al infrarrojo. ¿Cómo se explican estas propiedades desde el punto de vista de los fotones?

7.- La piel humana es relativamente insensible a la luz visible, pero la radiación ultravioleta puede causarle quemaduras graves. ¿Tiene esto algo que ver con las energías de los fotones? Explique su respuesta.

Debate 12. Práctica Dispersión de Compton

http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica3/cuantica/compton/compton.html

El efecto Compton

Cuando se analiza la radiación electromagnética que ha pasado por una región en la que hay electrones libres, se observa que además de la radiación incidente, hay otra de frecuencia menor. La frecuencia o la longitud de onda de la radiación dispersada depende de la dirección de la dispersión.

Sea λ la longitud de onda de la radiación incidente, y λ' la longitud de onda de la radiación dispersada. Compton encontró que la diferencia entre ambas longitudes de onda estaba determinada únicamente por el ángulo θ de dispersión, del siguiente modo

$$\lambda'-\lambda=\lambda C(1-\cos\theta)$$

donde λc es una constante que vale 2.4262 10^{-12} m

Se explica el efecto Compton en términos de la interacción de la radiación electromagnética con electrones libres, que suponemos inicialmente en reposo en el sistema de referencia del observador.

En el Efecto Fotoeléctrico solamente hemos considerado que el fotón tiene una energía E=hf . Ahora bien, un fotón también tiene un momento lineal p=E/c.

Esta relación no es nueva, sino que surge al plantear las ecuaciones que describen las ondas electromagnéticas. La radiación electromagnética tiene momento y energía. Cuando analicemos cualquier proceso en el que la radiación electromagnética interactúa con las partículas cargadas debemos de aplicar las leyes de conservación de la energía y del momento lineal. En el caso del efecto fotoeléctrico, no se aplicó la ley de conservación del momento lineal por que el electrón estaba ligado a un átomo, a una molécula o a un sólido, la energía y el momento absorbidos están compartidos por el electrón y el átomo, la molécula o el sólido con los que está ligado.

Vamos a obtener la fórmula del efecto Compton a partir del estudio de un choque elástico entre un fotón y un electrón inicialmente en reposo.

Principio de conservación del momento lineal

Sea p con flecha derecha encima el momento lineal del fotón incidente,

$$p=E/c=h/fc=h/\lambda$$

Sea p con flecha derecha encima ' el momento lineal del fotón difundido,

$$p'=E'/c=hf'/c=h/\lambda'$$

Sea p con flecha derecha encima e es el momento lineal del electrón después del choque, se verificará que

p con flecha derecha encima = p con flecha derecha encima ' + p con flecha derecha encima e (1)

Principio de conservación de la energía

La energía del fotón incidente es **E=hf**

La energía del fotón dispersado es **E'=hf'.**

La energía cinética del electrón después del choque no es 1/2mev2 ya que el electrón de retroceso alcanza velocidades cercanas a la de la luz, tenemos que reemplazarla por la fórmula relativista equivalente

$Ek=c\sqrt{(m^2ec^2+p^2e)}-mec^2$

donde me es la masa en reposo del electrón $9.1\cdot10^{-31}$ kg

El principio de conservación de la energía se escribe

$E=E'+c\sqrt{(m2ec^2+p^2e)}-mec^2$ (2)

Resolviendo el sistema de ecuaciones (1) y (2) llegamos a la siguiente expresión

$$\frac{1}{E}-\frac{1}{E'}=\frac{1}{m_e c^2}(1-\cos\theta)$$

Teniendo en cuenta la relación entre frecuencia y longitud de onda se convierte en la expresión equivalente

$\lambda'-\lambda=h/mec(1-\cos\theta)$

$$\lambda-\lambda'=\frac{h}{m_e c^2}(1-\cos\theta)$$

Hemos obtenido el valor de la constante de proporcionalidad λc a partir de las constantes fundamentales h, me y c.

Llegamos entonces a la conclusión de que podemos explicar la dispersión de la radiación electromagnética por los electrones libres como una colisión elástica entre un fotón y un electrón en reposo en el sistema de referencia del observador. A partir de las ecuaciones de conservación del momento lineal y de la energía, llegamos a la

ecuación que nos relaciona la longitud de onda de la radiación incidente λ con la longitud de onda de la radiación dispersada λ’ y con el ángulo de dispersión θ .

- **Maravillas cuánticas:**
  https://www.youtube.com/watch?v=VO9-_8mRNPs
- **Efecto fotoeléctrico:**
  https://www.youtube.com/watch?v=5CLj9uJPQKg
- **Efecto Compton:**
  https://www.youtube.com/watch?v=UBylzWsQarA
  https://www.youtube.com/watch?v=QvSbTQtlFIM&t=3s
  https://www.youtube.com/watch?v=f5_1nbVgv-I
  https://www.youtube.com/watch?v=fQ7eZOvhf0I
- **Hoy si vas a entender la cuántica**
  https://www.youtube.com/watch?v=7-TuaLHCZfM

Cuestionario:

1.- ¿Qué es el efecto fotoeléctrico y cómo lo aplicarías a una Nanocapa?

2.- ¿Qué es el efecto Compton?

3.- ¿Qué es física moderna?

Debate 13. Problemas de Física Moderna

Efecto Compton
https://www.youtube.com/watch?v=sGx9ukPItL4 6:30

Demonio de maxwell
https://www.youtube.com/watch?v=-lbr0xc3LeY 5:52

Las cámaras de visión nocturna se han convertido en el equipo estándar para la policía y la milicia en Estados Unidos. Contienen lentes y producen imágenes como la mayor parte de los instrumentos ópticos, pero su propósito principal es captar luz débil e intensificarla para que los usuarios puedan ver imágenes con muy poca luz

(Figura 36.1). La manera en la que funciona la cámara no depende de las propiedades del rayo u onda de la luz, sino de sus características de fotón, que analizaremos en este capítulo.

Cuando la luz interactúa con objetos materiales, revela con frecuencia una naturaleza como de partícula, con diminutos paquetes de ondas llamados fotones que interactúan con átomos o moléculas individuales o células biológicas. En una cámara de visión nocturna, los fotones se convierten en señales eléctricas en un proceso llamado efecto fotoeléctrico, y las señales se hacen más fuertes mediante dispositivos llamados tubos fotomultiplicadores o placas microcanal. (En este capítulo analizaremos los procesos que sustentan estos dispositivos). Luego, los electrones resultantes se vuelven a convertir en luz al chocar con una pantalla fosforescente. El proceso amplifica la luz para que podamos ver las imágenes en la oscuridad, pero elimina cierto detalle y toda la información de color, como se puede ver en la Figura 36.1.

¿La existencia de fotones significa que, después de todo, la luz no es una onda? En este capítulo veremos que la diferencia entre una onda y una partícula no es clara. A escalas muy pequeñas, las ondas pueden actuar como partículas y éstas, a su vez, como ondas. Este descubrimiento dio lugar a cambios revolucionarios en nuestra comprensión de la física, de gran alcance como los cambios en espacio y tiempo descritos por la relatividad. Los capítulos restantes de este libro están dedicados al análisis de estos cambios, conocidos como física cuántica.

36.1 La naturaleza de la materia, el espacio y el tiempo

Por ahora usted ha aceptado la noción de que la materia consta de ciertos constituyentes llamados átomos. Originalmente se pensó que los átomos eran indivisibles, de ahí el nombre de átomo, que se deriva de la palabra griega ατομος (individual o indivisible). Veremos que en la realidad tienen una subestructura. Consisten en una “nube” de electrones que rodean un núcleo, que a su vez consta de neutrones y protones. En la actualidad, los físicos creen que los electrones no tienen estructura, pero se sabe que los protones y neutrones constan cada uno de tres quarks, unidos por gluones (Vea la sección 21.2). Se considera también que estos quarks y gluones son elementales; es decir, se cree que carecen de subestructura. El tema de los capítulos 37 al 40 trata de cómo los físicos han llegado a estas deducciones y conclusiones. Por ahora, es suficiente señalar que la materia es granular, consta de las piezas indivisibles más pequeñas.

¿Qué hay acerca del tiempo y el espacio, son granulares también? En el capítulo 35 sobre relatividad, encontramos algunos resultados bastante sorprendentes acerca de la conexión bastante sorprendente entre el tiempo y el espacio. Sin embargo, no hemos considerado aún la pregunta de si el tiempo o el espacio pueden subdividirse en cantidades infinitesimalmente pequeñas. En cálculo se supone que el tiempo es

un continuo, no granular, porque los límites de se usan para llegar a las definiciones de velocidad y aceleración. La energía y la cantidad de movimiento se relacionan entre sí de formas similares a como se relacionan el espacio y el tiempo. Esto hace surgir de inmediato la pregunta de si la energía y la cantidad de movimiento son cantidades continua, o si existe algún gránulo de energía más pequeño y alguna cantidad de movimiento elemental. Por ejemplo, una bola que gira tiene energía cinética rotacional. Al incrementar su velocidad angular, incrementamos también su energía cinética. Pero, ¿podemos hacer el incremento infinitesimalmente pequeño, o hay algún cuanto de energía más pequeño que estemos obligados a añadir?

Empecemos esta investigación echando otra ojeada a la luz. La luz puede considerarse como una onda electromagnética, como muestra el capítulo 31. En nuestros estudios de la luz, exploramos primero la óptica geométrica en los capítulos 32 y 33, examinando la formación de imágenes con espejos, lentes y otros instrumentos ópticos. Consideramos la luz sólo como rayos, suponiendo que ésta se mueve a lo largo de líneas rectas. Al considerar, en el capítulo 34, los efectos físicos, como la interferencia y la difracción, nos vimos obligados a invocar el carácter ondulatorio de la luz. En el capítulo 34 se halló que el carácter ondulatorio de la luz entra en juego sólo cuando exploramos las dimensiones espaciales en el orden de la longitud de onda de la luz y que la óptica de rayos es una muy buena aproximación para las dimensiones especiales que son muy grandes en comparación con la longitud de onda.

¿Nuestra descripción previa de la luz como una onda electromagnética será suficiente para describir los fenómenos que podemos observar? La respuesta es no, como se explica en las siguientes secciones.

36.2 Radiación de cuerpo negro.

Cuando hablamos acerca de la radiación térmica en el capítulo 18, se introdujo el concepto idealizado de un cuerpo negro. Esta idealización se puede conocer con bastante exactitud examinando la radiación proveniente de un pequeño orificio en una gran cavidad mantenida a una temperatura T. Si vemos la luz visible que emerge de tal orificio a temperatura ambiente, el orificio se ve negro porque toda la luz que entre a la cavidad se disperse y, en última instancia, es absorbida por las paredes. Sin embargo, a temperaturas mucho más altas, este orificio comienza a brillar en la parte visible del espectro electromagnético. Los ejemplos diarios de luz visible de radiación de cuerpo negro incluyen el color rojo apagado de los elementos de cocción de estufas eléctricas, la luz brillante del filamento de una bombilla incandescente y la luz del Sol (Figura 36.2).

Cuestionario:

1.- ¿Por qué un objeto calentado al blanco es más caliente que uno al rojo vivo?

2.- Después de leer este capítulo, opine acerca de si un electrón es una partícula o una onda.

3.- Si me miro en un espejo mientras uso una camisa azul, veo una camisa azul en mi reflexión, no una camisa roja. Pero de acuerdo con el efecto de Compton, los fotones que rebotan deben tener una menor energía y, por lo tanto, una longitud de onda más grande. Explique por qué mi reflexión muestra el mismo color de camisa que estoy usando.

4.- El vacío en el espacio profundo no está vacío, sino que un mar hirviente de partículas y antipartículas se está formando y aniquilando de forma constante. Determine el tiempo de vida mínimo para que se forme un par protón-antiprotón sin violar la relación de incertidumbre de Heisenberg.

5.- Considere un universo en el que la constante de Planck es 5 J s. ¿Cómo cambiaría un juego de tenis? Considere las interacciones de cada uno de los jugadores con la pelota y la interacción de ésta con la red.

6.- En mecánica clásica, para una partícula sin fuerza neta sobre ella, ¿qué información se requiere para predecir dónde estará la partícula cierto tiempo después? ¿Por qué esta predicción no es posible en Física cuántica?

7.- ¿Cuál sería el resultado que esperaría un físico clásico de dirigir una lámpara UV más brillante sobre una superficie metálica, en términos de la energía de los electrones emitidos? ¿Cómo difiere esto de lo que predice la teoría del efecto fotoeléctrico?

8.- ¿Qué es más dañino para el tejido humano, una fuente de luz de 60 W de luz visible o una fuente de 2 mW de rayos X? Explique su elección.

9.- Está realizando un experimento de efecto fotoeléctrico. Con un fotocátodo hecho de cesio, usted lo ilumina primero con un haz láser verde (lambda = 514.5 nm) de potencia 100 mW. A continuación, usted duplica la potencia de su haz láser, a 200 mW. ¿Cómo se comparan las energías por electrón de los electrones emitidos por el cátodo para estos dos casos?

Debate 14. Ondas de Broglie

En 1924, el físico francés, Louis-Victor de Broglie (1892-1987), formuló una hipótesis en la que afirmaba que:

Toda la materia presenta características tanto ondulatorias como corpusculares comportándose de uno u otro modo dependiendo del experimento específico.

Para postular esta propiedad dual de la materia, De Broglie se basó en la explicación del efecto fotoeléctrico, que poco antes había dado Albert Einstein sugiriendo la naturaleza cuántica de la luz. Para Einstein, la energía transportada por las ondas luminosas estaba cuantizada, distribuida en pequeños paquetes energía o cuantos de luz, que más tarde serían denominados fotones, y cuya energía dependía de la frecuencia de la luz a través de la relación $E = h\nu$ donde v es la frecuencia luminosa y h es la constante de Planck. Albert Einstein proponía de esta forma, que en determinados procesos las ondas electromagnéticas que forman la luz se comportan como corpúsculos. De Broglie se preguntó que por qué no podría ser de manera inversa, es decir, que una partícula material (un corpúsculo) pudiese mostrar el mismo comportamiento que una onda.

El físico francés relacionó la longitud de onda, λ (lambda) con el módulo de la cantidad de movimiento, p de la partícula, mediante la fórmula:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

donde λ es la longitud de la onda asociada a la partícula de cantidad de movimiento p y h es la constante de Planck.

En Física clásica no relativista el módulo del vector $\vec{p}$, o cantidad de movimiento de la partícula es el producto de su masa por su velocidad

$$p = mv$$

Y por lo tanto la expresión clásica de la longitud de onda de De Broglie es

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

En esta aproximación clásica, (válida a bajas velocidades), viendo la fórmula se aprecia fácilmente que a medida que la velocidad del cuerpo aumenta, disminuye considerablemente la longitud de onda. También se observa que la longitud de onda es minúscula para objetos macroscópicos, debido al gran valor de su masa.

Si la velocidad de la partícula es alta, o sea significativamente importante respecto de la velocidad de la luz c, ya no es posible utilizar la expresión clásica de la

cantidad de movimiento, sino que es necesario utilizar la que proporciona la Relatividad Especial:

$$\vec{p} = m\gamma\vec{v}$$

Y su módulo

$$p = m\gamma v$$

En donde

$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$ es el llamado factor de Lorentz

Y m es la masa invariante de la partícula.

Así pues, la expresión relativista de la longitud de onda de De Broglie es

$$\lambda = \frac{h}{m\gamma v}$$

Esta hipótesis ondulatoria de la materia se confirmó tres años después para los electrones, con la observación de los resultados del experimento de la doble rendija de Young en la difracción de electrones en dos investigaciones independientes. En la Universidad de Aberdeen, George Paget Thomson pasó un haz de electrones a través de una delgada placa de metal y observó los diferentes esquemas predichos. En los Laboratorios Bell, Clinton Joseph Davisson y Lester Halbert Germer guiaron su haz a través de una celda cristalina.

La ecuación de De Broglie se puede aplicar a toda la materia; los cuerpos macroscópicos, también tendrían asociada una onda, pero, dado que su masa es muy grande, la longitud de onda resulta tan pequeña que en ellos se hace imposible apreciar sus características ondulatorias.

De Broglie recibió el Premio Nobel de Física en 1929 por esta hipótesis. Thomson y Davisson compartieron el Nobel de 1937 por su trabajo experimental.

- Longitud de onda de De Broglie | https://www.youtube.com/watch?v=DrnCemdUSzQ&t=9s

- Función de onda cuántica https://www.youtube.com/watch?v=lKbUG3VvUDQ&t=40s

Cuestionario:

1.- ¿Que es una onda de materia y cómo podríamos medirla?

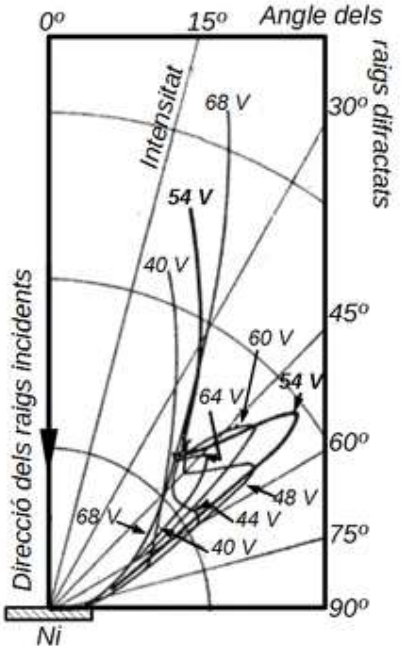
2.- Si me miro en un espejo mientras uso una camisa azul, veo una camisa azul en mi reflexión, no una camisa roja. Pero de acuerdo con el efecto de Compton, los fotones que rebotan deben tener una menor energía y, por lo tanto, una longitud de onda más grande. Explique por qué mi reflexión muestra el mismo color de camisa que estoy usando.

3.- ¿En qué consiste el experimento de Davisson Germer?

Debate 15. Experimento de Davisson - Germer

https://www.youtube.com/watch?v=Ho7K27B_Uu8

Experimento de Davisson-Germer



Intensidad de electrones difractados en el experimento de Davisson-Germer respecto del ángulo de difracción para diferencias de potencial de 40 V a 68 V de los electrones incidentes perpendicularmente al plano cristalográfico (111) de un monocristal de níquel

El experimento de Davisson-Germer es un importante experimento realizado en 1927 por los físicos estadounidenses Clinton Joseph Davisson(1881-1958) y Lester Halbert Germer (1896-1971) con el que demostraron que las partículas de materia presentan características de ondas en determinadas condiciones, confirmando la hipótesis de de Broglie de 1924 sobre la dualidad onda-partícula. El experimento consistió en bombardear un cristal de níquel con un haz de electrones; en la placa receptora se observó, como en el caso de los rayos X, que los electrones eran difractados por la red cristalina.

Antecedentes

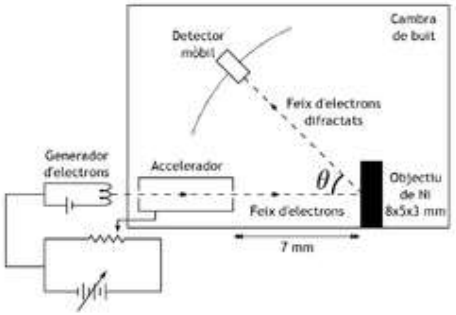
A partir de 1921 Clinton J. Davisson publicó diferentes artículos sobre la dispersión de electrones por cristales de diferentes metales (níquel, aluminio, platino y magnesio), junto con Charles Henry Kunsman. En 1925 el joven estudiante de doctorado Walter Maurice Elsässer, de la Universidad de Gotinga, comentó que la naturaleza ondulatoria de la materia podía ser investigada mediante experimentos de dispersión de electrones en sólidos cristalinos, al igual que la naturaleza de onda de los rayos X había confirmado a través de experimentos de dispersión de rayos X en los sólidos cristalinos, como los realizados por Davisson y Kunsman. 101112 Elsässer se basó en la tesis doctoral de 1924 del físico francés Louis-Victor de Broglie, en la que formuló la hipótesis revolucionaria que toda la materia, tales como electrones, átomos o moléculas, presenta características tanto corpusculares como ondulatorias y determinó la longitud de onda asociada a una partícula:

$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$ donde λ es la longitud de la onda asociada a la partícula de masa m que se mueve a una velocidad v, y h es la constante de planck. El producto mv es también el módulo del vector $\vec{p}$, o cantidad de movimiento de la partícula. En 1925 Clinton J. Davisson y Lester H. Germer trabajaban en los Laboratorios Bell de Nueva York, pertenecientes a la compañía de telecomunicaciones estadounidense American Telephone and Telegraph (AT&T), investigando la reflexión de electrones por los metales. Tuvieron un accidente con una lámpara que contenía un trozo de níquel policristalino dentro del vacío cuando cayó sobre la lámpara un frasco con aire líquido y rompió la lámpara, quedando el níquel, que estaba caliente, expuesto al oxígeno del aire líquido que lo oxidó. Para reducir el óxido de níquel formado, y transformarlo de nuevo en níquel, lo calentaron suavemente en una corriente de hidrógeno. Esto provocó la transformación del cristal policristalino en monocristalino en diferentes zonas y, cuando repitieron el experimento, observaron que no se daban los mismos resultados que antes. Este descubrimiento hizo cambiar la investigación empleando muestras de níquel monocristalino.

La sugerencia de Elsässer fue comunicada por Max Born a los físicos reunidos en Oxford en un congreso de la Asociación Británica para el Avance de la Ciencia en el verano de 1926, al que asistió Clinton J . Davisson.Gracias a este congreso,

Davisson descubrió la importancia y el significado de su descubrimiento y lo comentó con Owen W . Richardson, Max Born y James Franck, los cuales también le hablaron de la nueva mecánica ondulatoria que acababa de publicar el físico Erwin Schrödinger. Con esta nueva información partió hacia Nueva York con el objetivo de demostrar la naturaleza corpuscular de los electrones.

Experimento



Esquema del aparato utilizado por Davisson y Germer en 1927

Aparato

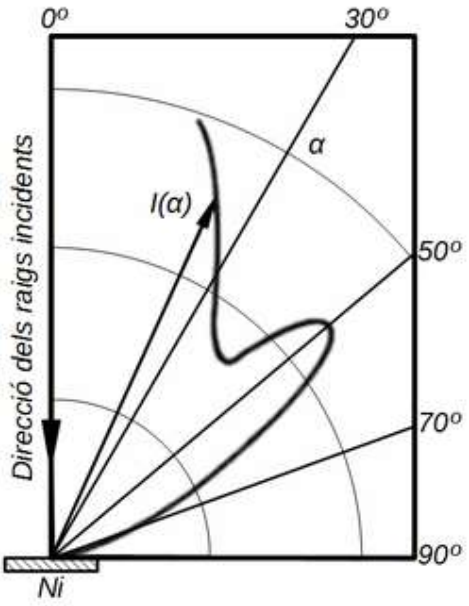
El aparato empleado por Davisson y Germer constaba de un cañón de electrones que se generaban por efecto termoiónico en una cinta de tungsteno calentada por el efecto Joule. Una vez emitidos, los electrones pasaban a una pequeña cámara donde estaban acelerados mediante una diferencia de potencial de decenas de voltios (entre 15 V y 350 V). El haz acelerado, de 1 mm de diámetro, se dirigía hacia un monocristal de níquel situado a 7 mm de la salida de los electrones, que impactaban verticalmente. El objetivo era un monocristal de níquel de 8 mm × 5 mm × 3 mm, que podía girar sobre el eje de incidencia del haz de electrones. El níquel tiene una estructura cristalina de tipo cúbica centrada en la cara. La cara que recibía el haz de electrones de forma perpendicular era paralela al plano cristalográfico definido por la índice de Miller (111).

Los electrones eran difractados por níquel y salían con un cierto ángulo que podía ser determinado mediante un detector, constituido por una doble jaula de Faraday y un galvanómetro que podía rotar entre 20 ° y 90 ° respecto de la dirección del haz incidente, al tiempo que medía la intensidad del haz de electrones. Ambos haces se movían en una cámara donde se había hecho el vacío a una presión entre $2 \cdot 10^{-6}$ mm Hg i $3 \cdot 10^{-6}$ mm Hg.

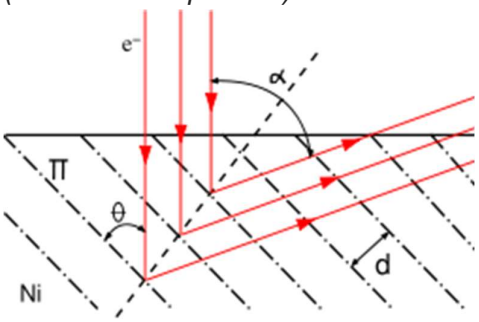
Observaciones

Davisson y Germer observaron que cuando hacían incidir los electrones acelerados sobre la superficie de níquel se producían máximos de intensidad que no se podían explicar considerando el electrón como una partícula que choca contra una

superficie llena de átomos de níquel esféricos, los cuales deberían de dispersar los electrones en todas direcciones. La máxima intensidad se alcanzaba acelerando los electrones con una diferencia de potencial de $\triangle V = 54V$ contra el cristal de níquel orientado con capas de átomos perpendiculares a la dirección de incidencia. En este caso concreto se producía una difracción por reflexión de los electrones con un máximo de intensidad a $\alpha = 50^\circ$ de la dirección de incidencia.



I*ntensidad de los electrones difractados para un voltaje de 54 V y lanzados perpendicularmente contra el plan cristalográfico (111) respecto del ángulo de difracción (coordenadas polares).*



Esquema de la difracción de electrones en el experimento de Davisson-Germer. El haz incidente impacto perpendicularmente a la superficie del Ni y llega a un plano cristalográfico con un ángulo $\alpha/2$ *respecto de la normal (línea discontinua) y* θ*respecto del plano. El haz reflejado también lo hace con un ángulo igual* $\alpha/2$*respecto de la normal y* θ *respecto del plano. El ángulo medido es* α*.*

Sin embargo el fenómeno observado era similar a la difracción de rayos X sobre una superficie cristalina descubierta en 1912 por el físico alemán Max von Laue con sus colaboradores Paul Knipping y Walter Friedrich, lo que le permitió determinar la naturaleza ondulatoria de los rayos X, considerados hasta ese momento como

haces de partículas de alta energía. La difracción de los rayos X fue estudiada en 1913 por William Lawrence Bragg y William Henry Bragg, los cuales pudieran relacionar los máximos de intensidad con las distancias entre las capas de átomos de un cristal.

La difracción de rayos X se produce porque esta radiación electromagnética tiene longitudes de onda muy corta, entre 10 nm y 100 pm, comparables a las distancias interatómicas los cristales (en el níquel esta es).En este caso se produce una dispersión de una manera especular, por reflexión, por los átomos del cristal, y los diferentes rayos difractados interfieren con interferencias constructivas y destructivas. Las primeras refuerzan la intensidad del haz y las segundas lo anulan.

En el experimento de Davisson y Germer se recogen los datos de la interferencia constructiva. La condición de interferencia constructiva para átomos adyacentes, la que produce un máximo de intensidad, es aquella que cumple que la diferencia de caminos, esto es , de dos rayos difractados es igual a la longitud de onda, , cuando se difractan rayos X. Aplicando la misma condición se puede calcular la longitud de onda de los electrones difractados:

En el experimento de Davisson y Germer se recogen los datos de la interferencia constructiva. La condición de interferencia constructiva para átomos adyacentes, la que produce un máximo de intensidad, es aquella que cumple que la diferencia de caminos, esto es , de dos rayos difractados es igual a la longitud de onda, , cuando se difractan rayos X. Aplicando la misma condición se puede calcular la longitud de onda de los electrones difractados:

$$\lambda = D \cdot \sin \alpha = 215\,pm \cdot \sin 50^\circ = 215\,pm \cdot 0,766 = 165\,pm$$

Longitud de onda de los electrones según De Broglie

La fórmula que dio De Broglie para la longitud de onda de una partícula de masa m que se mueve a una velocidad v es:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

donde h es la constante de Planck que vale $6,626 \cdot 10^{-34} J \cdot s$
La velocidad v de un electrón de carga e y masa m, acelerado por una diferencia de potencial $\triangle V$ se puede deducir con velocidades reducidas, es decir, sin considerar efectos relativistas, a partir de igualar el trabajo eléctrico $W_{AB} = -e \cdot \triangle V$ y la

variación de energía cinética entre el inicio y el final, $\triangle K_{AB} = K_B - K_A$. Como los electrones se aceleran desde el reposo es $v_A = 0$ y tenemos:

$K_B - K_A = \frac{1}{2}mv_B^2 - \frac{1}{2}mv_A^2 = \frac{1}{2}mv_B^2$

Igualando esta expresión en el trabajo eléctrico queda:

$\frac{1}{2}mv_B^2 = -e \cdot \triangle V$

Como la carga del electrón es negativa podemos escribir finalmente que:

$$v_B = \sqrt{\frac{2e\triangle V}{m}}$$

La longitud de onda de De Broglie será:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me\triangle V}}$$

Si se sustituye por los valores $h = 6,626 \cdot 10^{-34} J \cdot s$; $m = 9,1 \cdot 10^{-31} kg$; $e = 1,602 \cdot 10^{-19} C$; $\triangle V = 54V$

queda:

$\lambda = 1,67 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m} = 167\ pm$

Este valor coincide, dentro de los márgenes experimentales, con el valor obtenido por Davisson y Germer, lo que confirma la hipótesis de De Broglie. Como también lo confirman los datos obtenidos con experimentos con otros voltajes y con haces de electrones que incidían sobre superficies diferentes del cristal.

Difracción por planos cristalográficos internos

La difracción de los electrones, de la misma manera que los rayos X, se produce en ciertas direcciones preferentes que implican la participación de varias capas de planos paralelos de átomos de níquel dentro del cristal, ya que por su pequeña longitud de onda los rayos X tienen la capacidad de penetrar. Se cumple la formula de Bragg

$2 \cdot d \cdot \sin\theta = n \cdot \lambda$

con:

d = distancia entre dos planos cristalográficos;
θ=ángulo de difracción, ángulo entre el haz incidente y la dirección cristalográfica o el plan del cristal que produce la difracción;
n = orden de difracción (1, 2, 3,...);
λ = longitud de onda de los electrones.

En la experiencia de Davisson y Germer sobre un monocristal de níquel el haz de electrones penetran dentro del cristal y se reflejan en diferentes planos paralelos separados una distancia d=91 pm y con un ángulo de difracción $\theta = 65^\circ$.

Aplicando la fórmula de Bragg al máximo de primer orden n=1 resulta:
$\lambda = 2 \cdot d \cdot \sin\theta = 2 \cdot 0,91\,pm \cdot \sin 65^\circ = 165\,pm$

Se puede relacionar la distancia interatómica en la superficie del cristal, D, con la separación entre planos cristalográficos, d, y el ángulo entre el haz de rayos incidentes y el haz de rayos difractados. La mitad de este ángulo es igual al ángulo α que forma la superficie del cristal y la dirección de los planos cristalográficos, ya que la reflexión del haz de electrones cumple la ley de la reflexión (rayo incidente y rayo reflejado forman el mismo ángulo con la normal a la superficie de reflexión). Así pues, el ángulo entre el haz incidente y la normal es $\alpha/2$, y estas dos direcciones son perpendiculares a la superficie del cristal y el plano cristalográfico respectivamente, por lo tanto éstas forman el mismo ángulo $\alpha/2$. La relación resulta ser:
$d = D \cdot \sin\frac{\alpha}{2}$

El ángulo entre el haz incidente y el plano cristalográfico,θ es igual a $\frac{\pi}{2} - \frac{\alpha}{2}$. Y la fórmula de Bragg se puede poner en función de este nuevo ángulo $\alpha/2$ y simplificar usando la identidad trigonométrica $\sin\left(\frac{\pi}{2} - \beta\right) = \cos\beta$:
$2 \cdot d \cdot \sin\,\theta = 2 \cdot d \cdot \sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\alpha}{2}\right) = 2 \cdot d \cdot \cos\frac{\alpha}{2} = n \cdot \lambda$
Si se sustituye d:
$2 \cdot D \cdot \sin\frac{\alpha}{2} \cdot \cos\frac{\alpha}{2} = n \cdot \lambda$
o, empleando la identidad trigonométrica del ángulo doble
$2 \cdot \sin\beta \cdot \cos\beta = \sin 2\beta$
$D \cdot \sin\alpha = n \cdot \lambda$
que es la ecuación empleada para demostración en el caso de reflexión en la superficie.

Cuestionario:

1.- Describe el experimento de Davisson Germer

2.- ¿Qué dice la ley de Bragg?

Debate 16. Electrones y Ondas de Materia

Ondas de materia y longitud de onda de De Broglie
https://www.youtube.com/watch?v=-9oBTyYYgjM

Ondas de Materia
En 1924, el físico francés, Louis-Victor de Broglie (1892-1987), formuló una hipótesis en la que afirmaba que:

Toda la materia presenta características tanto ondulatorias como corpusculares comportándose de uno u otro modo dependiendo del experimento específico.

Para postular esta propiedad dual de la materia, De Broglie se basó en la explicación del efecto fotoeléctrico, que poco antes había dado Albert Einstein sugiriendo la naturaleza cuántica de la luz. Para Einstein, la energía transportada por las ondas luminosas estaba cuantizada, distribuida en pequeños paquetes energía o cuantos de luz, que más tarde serían denominados fotones, y cuya energía dependía de la frecuencia de la luz a través de la relación $E = h\nu$ donde v es la frecuencia luminosa y h es la constante de Planck. Albert Einstein proponía de esta forma, que en determinados procesos las ondas electromagnéticas que forman la luz se comportan como corpúsculos. De Broglie se preguntó que por qué no podría ser de manera inversa, es decir, que una partícula material (un corpúsculo) pudiese mostrar el mismo comportamiento que una onda.

El físico francés relacionó la longitud de onda, λ (lambda) con el módulo de la cantidad de movimiento, p de la partícula, mediante la fórmula:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

donde λ es la longitud de la onda asociada a la partícula de cantidad de movimiento p y h es la constante de Planck.

En Física clásica no relativista el módulo del vector $\vec{p}$, o cantidad de movimiento de la partícula es el producto de su masa por su velocidad

$$p = mv$$

Y por lo tanto la expresión clásica de la longitud de onda de De Broglie es

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

En esta aproximación clásica, (válida a bajas velocidades), viendo la fórmula se aprecia fácilmente que a medida que la velocidad del cuerpo aumenta, disminuye considerablemente la longitud de onda. También se observa que la longitud de onda es minúscula para objetos macroscópicos, debido al gran valor de su masa.

Si la velocidad de la partícula es alta, o sea significativamente importante respecto de la velocidad de la luz c, ya no es posible utilizar la expresión clásica de la cantidad de movimiento, sino que es necesario utilizar la que proporciona la Relatividad Especial:

$$\vec{p} = m\gamma\vec{v}$$

Y su módulo

$$p = m\gamma v$$

En donde

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$ es el llamado factor de Lorentz

Y m es la masa invariante de la partícula.

Así pues, la expresión relativista de la longitud de onda de De Broglie es

$$\lambda = \frac{h}{m\gamma v}$$

Esta hipótesis ondulatoria de la materia se confirmó tres años después para los electrones, con la observación de los resultados del experimento de la doble rendija de Young en la difracción de electrones en dos investigaciones independientes. En la Universidad de Aberdeen, George Paget Thomson pasó un haz de electrones a través de una delgada placa de metal y observó los diferentes esquemas predichos. En los Laboratorios Bell, Clinton Joseph Davisson y Lester Halbert Germer guiaron su haz a través de una celda cristalina.

La ecuación de De Broglie se puede aplicar a toda la materia; los cuerpos macroscópicos, también tendrían asociada una onda, pero, dado que su masa es muy grande, la longitud de onda resulta tan pequeña que en ellos se hace imposible apreciar sus características ondulatorias.

De Broglie recibió el Premio Nobel de Física en 1929 por esta hipótesis. Thomson y Davisson compartieron el Nobel de 1937 por su trabajo experimental.

Cuestionario:

1.- ¿Cuál de las siguientes declaraciones es cierta?
a) Los objetos más masivos y rápidos tienen longitudes de onda de De Broglie más grandes que los objetos menos masivos y más lentos.
b) Los objetos menos masivos y más rápidos tienen longitudes de onda de De Broglie más grandes que los objetos más masivos y lentos.

c) Los objetos más masivos y lentos tienen longitudes de onda de De Broglie más grandes que los objetos menos
masivos y más rápidos.
d) Los objetos menos masivos y más lentos tienen longitudes de onda de De Broglie más grandes que los objetos más masivos y más rápidos.

2.- ¿Qué es longitud de onda de De Broglie?

3.- Describe con tus palabras la Naturaleza ondulatoria de las partículas

4.- ¿Qué tipo de experimento puede mostrar interferencia y/o difracción de la materia?

Debate 17. Relación de Incertidumbre

Revisar estos videos:

- HOY SÍ que vas a entender el PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE https://www.youtube.com/watch?v=JnEAMYltzi0
- Teoría cuántica | Principio de incertidumbre de Heisenberg https://www.youtube.com/watch?v=Iuor_Hoki6M
- Calcula incertidumbre en la posición. https://www.youtube.com/watch?v=MND_J1p6Fvg
- Cálculo de la incertidumbre en la velocidad https://www.youtube.com/watch?v=InldTyhMOEs

Relación de indeterminación de Heisenberg

En mecánica cuántica, la relación de indeterminación de Heisenberg o principio de incertidumbre establece la imposibilidad de que determinados pares de magnitudes físicas observables y complementarias sean conocidas con precisión arbitraria. Sucintamente, afirma que no se puede determinar, en términos de la física cuántica, simultáneamente y con precisión arbitraria, ciertos pares de variables físicas, como son, la posición y el momento lineal (cantidad de movimiento) de un objeto dado. En otras palabras, cuanta mayor certeza se busca en determinar la posición de una partícula, menos se conoce su momento lineal y, por tanto, su masa y velocidad.

Este principio fue enunciado por el físico teórico alemán Werner Heisenberg en 1927.

Existe en la actualidad un leve error provocado por el pensamiento clásico tan arraigado en el razonamiento humano, se tiende a creer que la indeterminación se debe a la intervención experimental a la hora de medir una propiedad. Sin embargo, lo que el principio de indeterminación sugiere es que las propiedades de la partícula se encuentran en estado de superposición y por tanto tienen atribuidos a la vez diferentes valores de posición y de momento lineal. En la intervención, a la hora de medir, obligamos a una de las magnitudes a tomar un valor, colapsando su función de onda, y dándonos así un resultado preciso para esta, por lo que aumenta irremediablemente la indeterminación en la otra medida.

El principio de indeterminación no tiene un análogo clásico y define una de las diferencias fundamentales entre física clásica y física cuántica. Desde un punto de vista lógico es una consecuencia de axiomas corrientes de la mecánica cuántica y por tanto estrictamente se deduce de los mismos.

Explicación cualitativa del principio de indeterminación

La explicación «divulgativa» del principio de indeterminación afirma que las variables dinámicas como posición, momento angular, momento lineal, etc. se definen de manera operacional, esto es, en términos relativos al procedimiento experimental por medio del cual son medidas: la posición se definirá con respecto a un sistema de referencia determinado, definiendo el instrumento de medida empleado y el modo en que tal instrumento se usa (por ejemplo, midiendo con una regla la distancia que hay de tal punto a las referencias).

Sin embargo, cuando se examinan los procedimientos experimentales por medio de los cuales podrían medirse tales variables resulta que la medida siempre acabará perturbada. En efecto, si por ejemplo pensamos en lo que sería la medida de la posición y velocidad de un electrón, para realizar la medida (para poder «ver» de algún modo el electrón) es necesario que un fotón de luz choque con el electrón, con lo cual está modificando su posición y velocidad; es decir, por el mismo hecho de realizar la medida, el experimentador modifica los datos de algún modo, introduciendo un error que es imposible de reducir a cero, por muy perfectos que sean nuestros instrumentos.

NOTA: Si la posición se mide, determinando la perturbación que genera la partícula en el campo gravitacional que le rodea, puede reducirse el error a cero. Debido a que toda partícula es afectada en diferentes medidas por los campos generados por otras.

Esta descripción cualitativa del principio, sin ser totalmente incorrecta, es engañosa en tanto que omite el principal aspecto del principio de indeterminación: el principio de indeterminación establece el límite de aplicabilidad de la física clásica. La física clásica concibe sistemas físicos descritos por medio de variables perfectamente definidas en el tiempo (velocidad, posición,...) y que en principio pueden conocerse con la precisión que se desee. Aunque en la práctica resultara imposible determinar la posición de una partícula con una precisión infinitesimal, la física clásica concibe tal precisión como alcanzable: es posible y perfectamente concebible afirmar que tal o cual partícula, en el instante de tiempo exacto 2 s, estaba en la posición exacta 1,57 m. En cambio, el principio de indeterminación, al afirmar que existe un límite fundamental a la precisión de la medida, en realidad está indicando que si un sistema físico real se describe en términos de la física clásica, entonces se está haciendo una aproximación, y la relación de incertidumbre nos indica la calidad de esa aproximación.

Por motivos culturales y educativos, las personas se suelen enfrentar al principio de incertidumbre por primera vez estando condicionadas por el determinismo de la física clásica. En ella, la posición x de una partícula puede ser definida como una función continua en el tiempo, x= x(t). Si la masa de esa partícula es m y se mueve a velocidades suficientemente inferiores a la de la luz, entonces el momento lineal de la partícula se define como masa por velocidad, siendo la velocidad la primera derivada en el tiempo de la posición: $p = m\frac{dx}{dt}$

Dicho esto, atendiendo a la explicación habitual del principio de incertidumbre, podría resultar tentador creer que la relación de incertidumbre simplemente establece una limitación sobre nuestra capacidad de medida que nos impide conocer con precisión arbitraria la posición inicial x(0) y el momento lineal inicial p(0). Ocurre que si pudiéramos conocer x(0) y p(0) , entonces la física clásica nos ofrecería la posición y la velocidad de la partícula en cualquier otro instante; la solución general de las ecuaciones de movimiento dependerá invariablemente de x(0) y p(0).
Esto es, resolver las ecuaciones del movimiento lleva a una familia o conjunto de trayectorias dependientes de x(0) y p(0); según qué valor tomen x(0) y p(0), se tendrá una trayectoria dentro de esa familia u otra, pero la propia resolución de las ecuaciones limita el número de trayectorias a un conjunto determinado de ellas.
Según se ha razonado, de acuerdo con el principio de incertidumbre x(0) y p(0) no se pueden conocer exactamente, así que tampoco podrán conocerse x(t) y p(t) en cualquier otro instante con una precisión arbitraria, y la trayectoria que seguirá la partícula no podrá conocerse de manera absolutamente exacta. Este razonamiento es, sin embargo, incorrecto, pues en él subyace la idea de que, pese a que x(0) y p(0) no se pueden conocer exactamente, es posible continuar usando la descripción clásica en virtud de la cual una partícula seguirá una trayectoria definida por la

solución general de las ecuaciones de movimiento, introduciendo la noción añadida de que las condiciones iniciales x(0) y p(0) no pueden conocerse al detalle: esto es, no podemos conocer exactamente qué trayectoria va a seguir la partícula, pero estaremos aceptando que, de facto, va a seguir una.

Esta forma de proceder es, sin embargo, totalmente incorrecta: el principio de incertidumbre conlleva un desvío completo de las concepciones clásicas, haciendo que la noción clásica de trayectoria debe ser desechada: preguntar cuáles son simultáneamente los valores de x(t) y p(t) es un absurdo. Así dicho, podría resultar paradójico que primero se establezca una relación de incertidumbre en términos de posición x y momento lineal p, para luego afirmar que x y p , que aparecen en dicha relación, no tienen sentido: si no tienen sentido, ¿qué sentido puede tener una relación que las emplee? Ocurre que, en física cuántica, es posible introducir una serie de entidades matemáticas x y p que se correspondan en muchos aspectos con la posición y el momento clásicos. Dichas entidades no son, no obstante, exactamente iguales a la posición y el momento clásicos: el principio de incertidumbre sencillamente indica que si interpretamos esas entidades como posición y momento lineal -y por tanto interpretamos el movimiento de una forma clásica-, entonces existe un límite fundamental en la precisión con que dichas variables pueden ser conocidas; esto es, si intentamos introducir variables clásicas e intentamos interpretar el movimiento de forma clásica, la precisión con que estas variables pueden ser especificadas está limitada.

Consecuencias de la relación de indeterminación

Este principio supone un cambio básico en la naturaleza de la física, ya que se pasa de un conocimiento absolutamente preciso (en teoría aunque no en la práctica), al conocimiento basado solo en probabilidades. Aunque debido a la pequeñez de la constante de Planck, en el mundo macroscópico la indeterminación cuántica es casi siempre completamente despreciable, y los resultados de las teorías físicas deterministas, como la teoría de la relatividad, siguen teniendo validez en todos casos prácticos de interés.

Las partículas, en mecánica cuántica, no siguen trayectorias definidas. No es posible conocer exactamente el valor de todas las magnitudes físicas que describen el estado de movimiento de la partícula en ningún momento, sino solo una distribución estadística. Por lo tanto no es posible asignar una trayectoria a una partícula. Sí se puede decir que hay una determinada probabilidad de que la partícula se encuentre en una determinada región del espacio en un momento determinado.

Comúnmente se considera que el carácter probabilístico de la mecánica cuántica invalida el determinismo científico. Sin embargo, existen varias interpretaciones de la mecánica cuántica y no todas llegan a esta conclusión. Según puntualiza Stephen

Hawking, la mecánica cuántica es determinista en sí misma, y es posible que la aparente indeterminación se deba a que realmente no existen posiciones y velocidades de partículas, sino solo ondas. Los físicos cuánticos intentarían entonces ajustar las ondas a nuestras ideas preconcebidas de posiciones y velocidades. La inadecuación de estos conceptos sería la causa de la aparente impredecibilidad. Otros fenómenos deducibles o conectados con el principio de indeterminación de Heisenberg son:

- Efecto túnel
- Energía del punto cero
- Existencia de partículas virtuales
- Energía del vacío e inexistencia del vacío absoluto.
- Radiación de Hawking e inestabilidad de agujeros negros

Enunciado matemático
Si se preparan varias copias idénticas de un sistema en un estado determinado, como puede ser un átomo, las medidas de la posición y de la cantidad de movimiento variarán de acuerdo con una cierta distribución de probabilidad característica del estado cuántico del sistema.

Las medidas del objeto observable sufrirán desviación estándar Δx de la posición y el momento Δp. Verifican entonces el principio de indeterminación que se expresa matemáticamente como:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

donde la h es la constante de PLANCK (para simplificar, $\frac{h}{2\pi}$ suele escribirse como $\hbar$).
El valor conocido de la constante de Planck es:
$h = \ 6,626\ 0693(11) \times 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}\ =\ 4,135\ 667\ 43(35) \times 10^{-15}\ \mathrm{eV \cdot s}$
En la física de sistemas clásicos esta indeterminación de la posición-momento no se manifiesta puesto que se aplica a estados cuánticos del átomo y h es extremadamente pequeño. Una de las formas alternativas del principio de indeterminación más conocida es la indeterminación tiempo-energía que puede escribirse como:

$$\Delta E \cdot \Delta \tau \geq \frac{\hbar}{2}$$

Esta forma es la que se utiliza en mecánica cuántica para explorar las consecuencias de la formación de partículas virtuales, utilizadas para estudiar los estados intermedios de una interacción. Esta forma del principio de indeterminación es también la utilizada para estudiar el concepto de energía del vacío.

UNIDADES DE PLANCK

https://es.wikipedia.org/wiki/Unidades_de_Planck

Longitud de Planck

https://es.wikipedia.org/wiki/Longitud_de_Planck

Cuestionario:

1.- ¿En qué consiste el experimento de Stern-Gerlach?

2.- ¿Qué establece el principio de exclusión de Pauli.

3.- ¿Qué es el condensado o distribución de Bose-Einstein?.

4.- ¿Qué es el condensado de Fermi-Dirac?.

Debate 18. Experimento de Stern - Gerlach. Espin

Física cuántica. Lección 5: Espín
https://www.youtube.com/watch?v=LPFY6GUnoVM 20:02
Que no te mareen ¡Todo lo que siempre quisiste saber sobre el SPÍN!
https://www.youtube.com/watch?v=Hq4Q36YSm8o 5:08

El espín (del inglés spin 'giro, girar') es una propiedad física de las partículas elementales por el cual tienen un momento angular intrínseco de valor fijo. El espín fue introducido en 1925 por Ralph Kronig e, independientemente, por George Uhlenbeck y Samuel Goudsmit. La otra propiedad intrínseca de las partículas elementales es la carga eléctrica.

Introducción

Si bien la teoría cuántica de la época no podía explicar algunas propiedades de los espectros atómicos, los físicos Goudsmit y Uhlenbeck descubrieron que, añadiendo un número cuántico adicional —el «número cuántico de espín»— se lograba dar una explicación más completa de los espectros atómicos. La primera evidencia experimental de la existencia del espín se produjo con el experimento realizado en 1922 por Otto Stern y Walther Gerlach, aunque su interpretación no llegará sino hasta 1927. Pronto, el concepto de espín se amplió a todas las partículas subatómicas, incluidos los protones, los neutrones y las antipartículas.

El espín proporciona una medida del momento angular intrínseco de toda partícula. En contraste con la mecánica clásica, donde el momento angular se asocia a la rotación de un objeto extenso, el espín es un fenómeno exclusivamente cuántico, que no se puede relacionar de forma directa con una rotación en el espacio. La intuición de que el espín corresponde al momento angular debido a la rotación de la partícula en torno a su propio eje solo debe tenerse como una imagen mental útil, puesto que, tal como se deduce de la teoría cuántica relativista, el espín no tiene una representación en términos de coordenadas espaciales, de modo que no se puede referir ningún tipo de movimiento. Eso implica que cualquier observador al hacer una medida del momento angular detectará inevitablemente que la partícula posee un momento angular intrínseco total, difiriendo observadores diferentes solo sobre la dirección de dicho momento, y no sobre su valor (este último hecho no tiene análogo en mecánica clásica).

Existe una relación directa entre el espín de una partícula y la estadística que obedece en un sistema colectivo de muchas de ellas. Esta relación, conocida empíricamente, es demostrable en teoría cuántica de campos relativistas.

Propiedades del espín

Representación del espín electrónico, donde se aprecia que la magnitud total del espín es muy diferente a su proyección sobre el eje z. La proyección sobre los ejes "x" e "y" está indeterminada; una imagen clásica que resulta evocadora es la precesión de un trompo.

Como propiedad mecanocuántica, el espín presenta una serie de cualidades que lo distinguen del momento angular clásico:

El valor de espín está cuantizado, por tanto no se pueden encontrar partículas con espín de cualquier valor.

El espín de una partícula siempre es un múltiplo entero $\hbar/2$ (donde $\hbar$ es igual a h de (donde es igual a h la constante de Planck dividida entre 2π, también llamada constante reducida de Planck). Esto está relacionado con las diferentes representaciones irreducibles del grupo de rotaciones SO(3), cada una de ellas caracterizada por un número entero m.

Cuando se mide el espín en diferentes direcciones, solo se obtienen una serie de valores posibles, que son sus posibles proyecciones sobre esa dirección. Por ejemplo, la proyección del momento angular de espín de un electrón, si se mide en

una dirección particular dada por un campo magnético externo, puede resultar únicamente en los valores o bien $\hbar/2$ o bien $-\hbar/2$.

Además, la magnitud total del espín es única para cada tipo de partícula elemental. Para los electrones, los protones y los neutrones, esta magnitud es, en unidades de $\hbar \cdot \sqrt{s(s+1)}$, siendo $s = 1/2$. Esto contrasta con el caso clásico donde el momento angular de un cuerpo alrededor de su eje puede asumir diferentes valores según la rotación sea más o menos rápida.

Teorema espín-estadística

Otra propiedad fundamental de las partículas cuánticas es que parecen existir solo dos tipos llamados fermiones y bosones, los primeros obedecen la estadística de Fermi-Dirac y los segundos la estadística de Bose-Einstein. Eso implica que los agregados de fermiones idénticos están descritos por funciones de onda totalmente anti simétricas mientras que los bosones idénticos vienen descritos por funciones de onda totalmente simétricas. Curiosamente existe una conexión entre el tipo de estadística que obedecen las partículas y su espín. Los fermiones tienen espines semienteros y los bosones enteros:

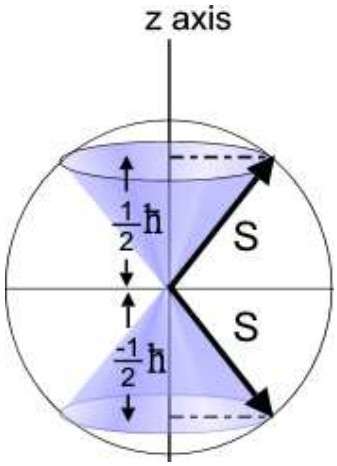
$$s_{\text{fermion}} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \qquad s_{\text{boson}} = m\hbar$$

Donde n y m son números enteros no negativos (números naturales) que dependen del tipo de partículas. Los electrones, neutrones y protones son fermiones de espín mientras que los fotones tienen espín $\hbar$. Algunas partículas exóticas como el pion o el bosón de Higgs tienen espín nulo. Los principios de la mecánica cuántica indican que los valores del espín se limitan a múltiplos enteros o semienteros de $\hbar$.

Experimento de Stern y Gerlach

El experimento de Stern y Gerlach, nombrado así en honor de los físicos alemanes Otto Stern y Walther Gerlach, es un famoso experimento realizado por primera vez en 1922 sobre la deflexión de partículas y que ayudó a sentar las bases experimentales de la mecánica cuántica. Puede utilizarse para ilustrar que los electrones y átomos tienen propiedades cuánticas intrínsecas, que las medidas afectan a las propiedades de las partículas medidas y que los estados cuánticos necesariamente se describen a través de números complejos.

Descripción



Las partículas tienen valores cuantizados de espín.

El experimento de Stern-Gerlach consistía en enviar un haz de átomos de plata a través de un campo magnético inhomogéneo. El campo magnético crecía en intensidad en la dirección perpendicular a la que se envía el haz. El espín de los diferentes átomos fuerza a las partículas de espín positivo +1/2 a ser desviadas hacia arriba y a las partículas de espín opuesto -1/2 a ser desviadas en el sentido contrario, y por lo tanto puede medir el momento magnético de las partículas.

En el caso clásico no cuántico, una partícula cualquiera con un momento magnético entrará en el campo magnético con su momento magnético orientado al azar. El efecto del campo magnético sobre tales partículas clásicas ocasionaría que fueran desviadas también en sentidos opuestos pero dependiendo el grado de deflexión del ángulo inicial entre el momento magnético y el campo magnético al que se somete el haz. Por lo tanto algunas partículas serían desviadas fuertemente, otras de manera más débil y progresivamente se irían encontrando partículas desviadas en ambas direcciones cubriendo todo el espectro de intensidades posibles.

Sin embargo, el experimento de Stern-Gerlach pone de manifiesto que esto no es así, y se observa que todas las partículas se desvían o bien hacia arriba o bien hacia abajo, pero ambos grupos con la misma intensidad. Las partículas tienen o bien espín $+\frac{\hbar}{2}$ o $-\frac{\hbar}{2}$, sin valores intermedios.
El momento magnético m del átomo puede medirse mediante esta experiencia, y es igual en módulo al magnetón de Bohr mB.

Historia

Placa conmemorativa del experimento de Stern-Gerlach situada en el instituto de física de Fráncfort del Meno.

Otto Stern y Walther Gerlach realizaron el experimento en Fráncfort del Meno, en 1922. En aquella época, Stern era ayudante de investigación de Max Born en el Instituto de Física Teórica de la Universidad de Fráncfort, y Gerlach era ayudante de investigación en el Instituto de Física Experimental de esa misma universidad.

Después de la primera guerra mundial, Otto Stern se vio interesado en los experimentos sobre haces moleculares de sodio realizados en 1911 por Louis Dunoyer, quien había demostrado que los "rayos moleculares" de sodio viajaban en línea recta. Otto Stern pensaba que utilizando tales haces se podían medir propiedades esenciales de la materia y poner a prueba las incipientes ideas cuánticas de la época. Walther Gerlach por su parte había realizado su doctorado trabajando sobre la emisión de cuerpo negro y el efecto fotoeléctrico dos de los pilares básicos de la mecánica cuántica y había trabajado posteriormente en el desarrollo de la telegrafía sin hilos.

En la época del experimento el modelo más famoso de la estructura atómica era el modelo de Bohr que describía los electrones como partículas que orbitaban el núcleo atómico cargado positivamente en orbitales cada uno de los cuales tenía asociado un cierto nivel de energía. Dado que los electrones estaban cuantizados, forzados a encontrarse en determinados niveles de energía se suponía que la cuantización estaba referida a una cuantización del espacio a escala subatómica.

El experimento tardó más de un año en poder ser desarrollado con éxito desde su concepción original. En la forma final del experimento un haz de átomos de plata (producidos por efusión del vapor metálico producido en un horno calentado a 1000 °C) era colimado por dos rendijas estrechas de unos 0.03 mm y atravesaban una bobina magnética de 3.5 cm de longitud con un campo magnético de una intensidad máxima de 0.1 teslas y un gradiente máximo de unos 10 tesla/cm. La desviación de los haces atómicos conseguida era tan sólo de 0.01 mm. El instrumento original solía estropearse unas pocas horas después de iniciarse el experimento por lo que tan sólo una fina capa de átomos de plata eran depósitos en el receptor final. Cuando Stern y Gerlach observaron el receptor no se veían trazas de la plata depositada pero a medida que exploraban la placa receptora esta empezó a cubrirse de un material que mostraba el paso del haz. Tal y como cuenta Gerlach en sus memorias la plata estaba reaccionando con los vapores de sulfuro que provenían de su respiración y de los cigarrillos que fumaba habitualmente.

Momento angular

El momento angular o momento cinético es una magnitud física, equivalente rotacional del momento lineal y representa la cantidad de movimiento de rotación de un objeto. Es una cantidad vectorial que caracteriza las propiedades de inercia de un cuerpo, que gira en relación con cierto punto. Se encuentra en las tres mecánicas (mecánica clásica, cuántica y relativista). En el Sistema Internacional de

Unidades el momento angular se mide en kg·m²/s. Esta magnitud desempeña respecto a las rotaciones un papel análogo al momento lineal en las traslaciones.

El nombre tradicional en español es momento cinético; momento angular es de uso común por la influencia del inglés angular momentum.

Bajo ciertas condiciones de simetría rotacional de los sistemas es una magnitud física que se mantiene constante con el tiempo a medida que el sistema va cambiando, lo cual da lugar a la llamada ley de conservación del momento angular. El momento angular para un cuerpo rígido que rota respecto a un eje es la resistencia que ofrece dicho cuerpo a la variación de la velocidad angular. Sin embargo, eso no implica que sea una magnitud exclusiva de las rotaciones; por ejemplo, el momento angular de una partícula que se mueve libremente con velocidad constante (en módulo y dirección) también se conserva.

Cuestionario:

1.- Describir qué es un ESPÍN

2.- ¿En qué consiste el experimento de Stern-Gerlach?

3.- ¿Que es El magnetón de Bohr (símbolo μ_B)

4.- ¿Qué es el momento angular?

Debate 19. Principio de indeterminación

Lineamientos generales.

https://www.agenciasinc.es/Noticias/Generado-en-el-espacio-el-quinto-estado-de-la-materia-el-condensado-de-Bose-Einstein.
Veamos los siguientes videos:

- Condensado Bose -Einstein en Mexico
  https://www.youtube.com/watch?v=s1zc_mKFqi8
- Se consigue CONDENSADO BOSE-EINSTEIN en el espacio
  https://www.youtube.com/watch?v=qU-N783ES9Q

- Estadística de Maxwell-Boltzmann
  https://www.youtube.com/watch?v=0F-UO_sKhrA

Estadística de Maxwell-Boltzmann

En física, la estadística de Maxwell-Boltzmann es una función estadística desarrollada para modelar el comportamiento de sistemas físicos regidos por la mecánica clásica. Esta función estadística clásica, formulada originalmente por los físicos J.C. Maxwell y L. Boltzmann, rige la distribución de un conjunto de partículas en función de los posibles valores de energía de los estados que estas pueden ocupar. Para cada sistema termodinámico, la distribución de Maxwell-Boltzmann no es otra cosa que la aplicación del colectivo canónico de la mecánica estadística, bajo el supuesto no-cuántico de que los números de ocupación de cada estado disponible son pequeños comparados con el número máximo de ocupación.

El principio de exclusión de Pauli

Es una regla de la mecánica cuántica, enunciada por Wolfgang Ernst Pauli en 1925. Establece que no puede haber dos fermiones con todos sus números cuánticos idénticos (esto es, en el mismo estado cuántico) dentro del mismo sistema cuántico.Formulado inicialmente como principio, posteriormente se comprobó que era derivable de supuestos más generales: de hecho, es una consecuencia del teorema de la estadística del espín.

Introducción

Históricamente el principio de exclusión de Pauli fue formulado para explicar la estructura atómica y la organización de la tabla periódica, y consistía en imponer una restricción sobre la distribución de los electrones en los diferentes estados cuánticos. Posteriormente, el análisis de sistemas de partículas idénticas llevó a la conclusión de que cualquier estado debía tener una simetría bajo intercambio de partículas peculiar, lo cual implicaba que existían dos tipos de partículas: Fermiones, que satisfarían el principio de Pauli, y bosones, que no lo satisfarían.

El principio de exclusión de Pauli estipula que dos Fermiones no pueden ocupar el mismo estado cuántico dentro del mismo sistema al mismo tiempo, mientras que para el caso de los electrones estipula que es imposible para 2 electrones en un mismo átomo tener los mismos 4 valores para los números cuánticos, donde esos 4 números incluyen el número cuántico principal, el número cuántico de momento angular, el número cuántico magnético y por último, el número cuántico de espín. Como se ha dicho, el principio de exclusión de Pauli solo es aplicable a Fermiones ,

esto es, partículas que forman estados cuánticos antisimétricos y que tienen espín semientero. Son Fermiones, por ejemplo, los electrones y los quarks (estos últimos son los que forman los protones y los neutrones). En cambio, partículas como el fotón, y el (hipotético) gravitón, no obedecen a este principio, ya que son bosones, esto es, forman estados cuánticos simétricos y tienen espín entero. Como consecuencia, una multitud de fotones puede estar en un mismo estado cuántico de partícula, como en los láseres.

Es sencillo derivar el principio de Pauli, basándonos en el teorema espín-estadístico aplicado a partículas idénticas. Los Fermiones de la misma especie, forman sistemas con estados totalmente antisimétricos, lo que para el caso de dos partículas significa que:
$|\psi(x)\psi'(x')\rangle = -|\psi'(x)\psi(x')\rangle$
La permutación de una partícula por otra, invierte el signo de la función que describe al sistema. Si las dos partículas ocupan el mismo estado cuántico |\psi \rangle , el estado del sistema completo es $|\psi\psi\rangle$. Entonces:
$|\psi(x)\psi(x')\rangle = -|\psi(x')\psi(x)\rangle = 0 \ (\text{ket nulo})$
En este caso, no puede darse porque el ket anterior no representa un estado físico. Este resultado puede generalizarse por inducción al caso de más de dos partículas.

Fermión
Distinción entre Fermiones y bosones

Un fermión es uno de los dos tipos básicos de partículas elementales que existen en la naturaleza (el otro tipo es el bosón). Los fermiones se caracterizan por tener espín semi-entero (1/2, 3/2, ...). En el modelo estándar de física existen dos tipos de fermiones fundamentales, los quarks y los leptones. Los fermiones se consideran los constituyentes básicos de la materia, que interactúan entre ellos vía bosones de gauge. El tipo de partícula se llama así en honor al científico italiano Enrico Fermi.

Bosón

Es uno de los dos tipos básicos de partículas elementales de la naturaleza (el otro tipo son losfermiones).

La denominación «bosón» fue acuñada por Paul Dirac para conmemorar la contribución del físico indio Satyendra Nath Bose, junto con Einstein, en el desarrollo de la Estadística de Bose-Einstein la cual teoriza las características de las partículas elementales. Entre los ejemplos de bosones se incluyen partículas fundamentales como fotones, gluones, bosones W y Z (los cuatro bosones de gauge, portadores de fuerza del modelo estándar), el bosón de Higgs, y el gravitón de gravedad cuántica; partículas compuestas (por ej.: mesones y núcleos estables de número de masa par como el deuterio (con un protón y un neutrón, número

másico = 2), helio-4 o plomo-208; y algunas cuasipartículas (pares de Cooper, plasmones, y fonones).

Los bosones se caracterizan por:
Tienen un espín entero (0,1,2,...)
No cumplen el principio de exclusión de Pauli y siguen la estadística de Bose-Einstein. Esto hace que presenten un fenómeno llamado condensación de Bose-Einstein (el desarrollo de máseres y láseres fue posible puesto que los fotones de la luz son bosones).

La función de onda cuántica que describe sistemas de bosones es simétrica respecto al intercambio de partículas.

Por el teorema espín-estadística sabemos que la segunda y tercera característica son consecuencia necesaria de la primera. Algunos bosones, aunque se comportan como bosones, de hecho están compuestos de otras partículas. Por ejemplo, los núcleos de átomos de helio, bajo ciertas condiciones, se comportan como bosones aun cuando están compuestos por cuatro fermiones que, a su vez, no son elementales cuando son examinados en experimentos de muy alta energía.

Estadística de Fermi-Dirac
Es la forma de contar estados de ocupación de forma estadística en un sistema de fermiones. Forma parte de la Mecánica Estadística. Y tiene aplicaciones sobre todo en la Física del estado sólido. La energía de un sistema mecanocuántico está discretizada. Esto quiere decir que las partículas no pueden tener cualquier energía, sino que ha de ser elegida de entre un conjunto de valores discretos. Para muchas aplicaciones de la física es importante saber cuántas partículas están a un nivel dado de energía. La distribución de Fermi-Dirac nos dice cuánto vale esta cantidad en función de la temperatura y el potencial químico. La estadística F-D fue publicada por vez primera en 1926 por Enrico Fermi y Paul Dirac.

Estadística de Bose-Einstein

Es un tipo de mecánica estadística aplicable a la determinación de las propiedades estadísticas de conjuntos grandes de partículas indistinguibles capaces de coexistir en el mismo estado cuántico (bosones) en equilibrio térmico. A bajas temperaturas, los bosones tienden a tener un comportamiento cuántico similar que puede llegar a ser idéntico a temperaturas cercanas al cero absoluto en un estado de la materia conocido como condensado de Bose-Einstein y producido por primera vez en laboratorio en el año 1995. El condensador Bose-Einstein funciona a temperaturas cercanas al cero absoluto, -273,15 °C (0 kelvin). La estadística de Bose-Einstein fue introducida para estudiar las propiedades estadísticas de los fotones en 1920 por el físico indio Satyendra Nath Bose y generalizada para átomos y otros bosones por Albert Einstein en 1924. Este tipo de estadística está íntimamente relacionada con la

estadística de Maxwell-Boltzmann (derivada inicialmente para gases) y a las estadísticas de Fermi-Dirac (aplicables a partículas denominadas fermiones sobre las que rige el principio de exclusión de Pauli que impide que dos fermiones compartan el mismo estado cuántico). La estadística de Bose-Einstein se reduce a la estadística de Maxwell-Boltzmann para energías suficientemente elevadas.

EQUINOCCIO

Cada seis meses, primero en el mes de marzo y luego en septiembre, un equinoccio divide el día de la Tierra casi a la mitad, lo que nos da aproximadamente 12 horas de luz diurna y 12 horas nocturnas.

El equinoccio del mes de septiembre marca el paso del verano al otoño para el hemisferio norte y el paso del invierno a la primavera para el hemisferio Sur. En los polos, el cambio es mucho más drástico, pasando de seis meses de luz a seis meses de oscuridad para el Polo Norte y viceversa en el Polo Sur.

Este año 2021 el equinoccio tendrá lugar el día miércoles 22 de septiembre a las 19h21 UTC, lo que corresponde a las 14h 21, hora de Ecuador de este miércoles.

¿Qué es un equinoccio?

Equinoccio es una palabra que también tiene su origen en el latín y proviene de aequinoctium, que significa “noches iguales”. El equinoccio se produce cuando el sol se encuentra sobre la línea del ecuador, por lo que el día y la noche en ambos hemisferios tienen exactamente la misma duración.

¿Por qué el Sol se mueve de norte a sur?

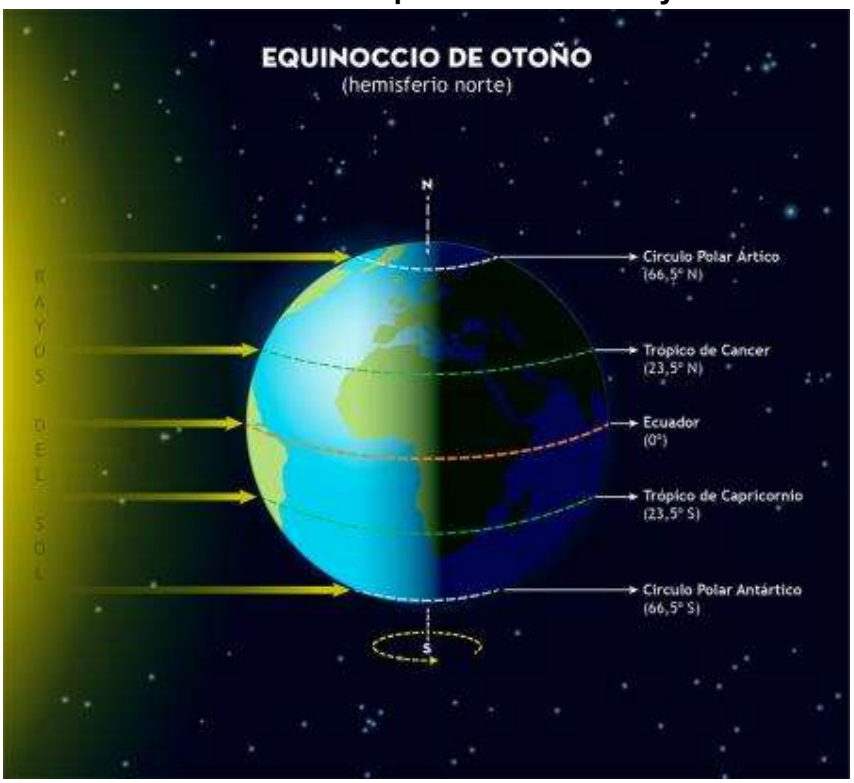
Durante el transcurso de un año, el punto subsolar, el punto en la superficie de la Tierra directamente debajo del Sol, se mueve lentamente a lo largo de un eje norte-sur. Habiendo alcanzado su punto más al norte en el solsticio de junio, comienza a moverse hacia el sur hasta que cruza el ecuador el día del equinoccio de septiembre. El solsticio de diciembre marca el punto más al sur de su viaje.

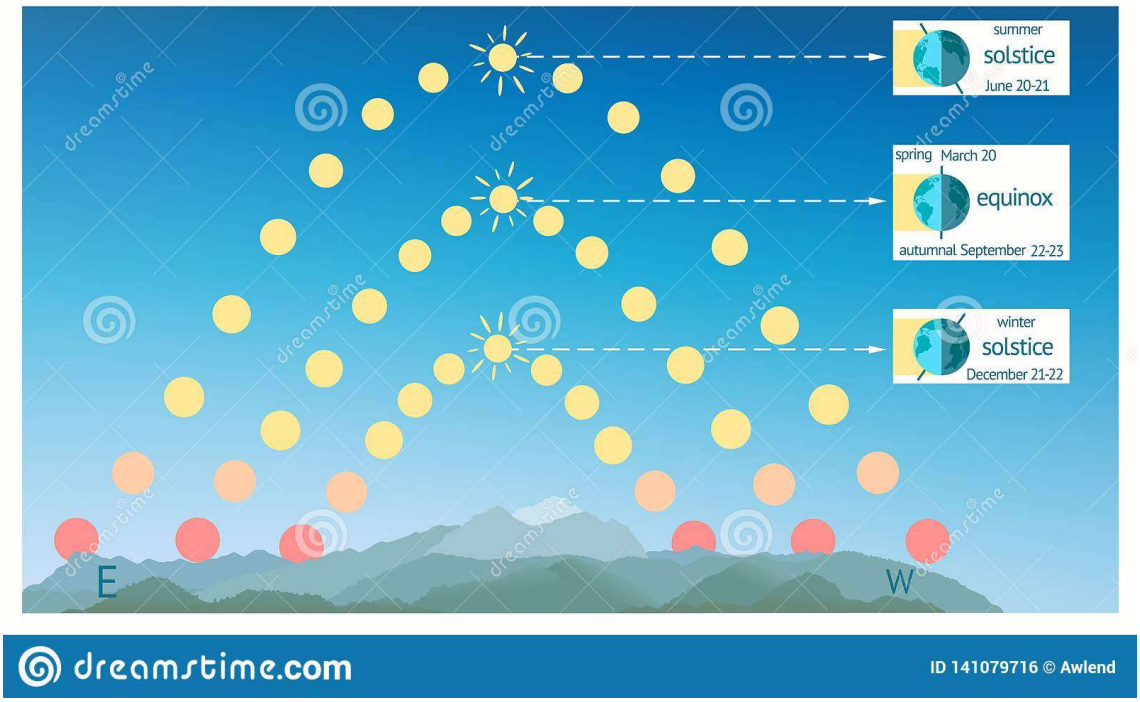
A medida que la Tierra viaja hacia el lado opuesto de su órbita, al que llega en diciembre, el hemisferio sur recibe gradualmente más luz solar y el punto subsolar viaja hacia el sur. Equinoccio de marzo marca el inicio de la primavera en el hemisferio norte y del otoño en el hemisferio sur. Durante el equinoccio, el Sol está exactamente sobre el ecuador, lo que hace que el día y la noche tengan la misma longitud en todos los sitios del planeta.

La trayectoria que sigue la Tierra en su movimiento alrededor del Sol se conoce como eclíptica. Este plano no coincide con el ecuador terrestre debido a que el eje

de rotación de la tierra se encuentra inclinado 23,4 grados. Por tanto, la radiación solar no siempre llega con la misma intensidad en toda la Tierra, sino que llega en distinta cantidad a los hemisferios dependiendo de la época del año, de aquí surgen las estaciones del año en diferentes partes del mundo.

En los polos, el cambio es mucho más drástico, pasando de seis meses de luz a seis meses de oscuridad para el Polo Norte y viceversa en el Polo Sur.





Cuestionario:

1.- ¿Qué es un estado de la materia?

2.- Describe qué entiendes por la estadística de Bose-Einstein

3.- Describe la estadística de Fermi-Dirac

4.- Describe la estadística de Maxwell-Boltzmann

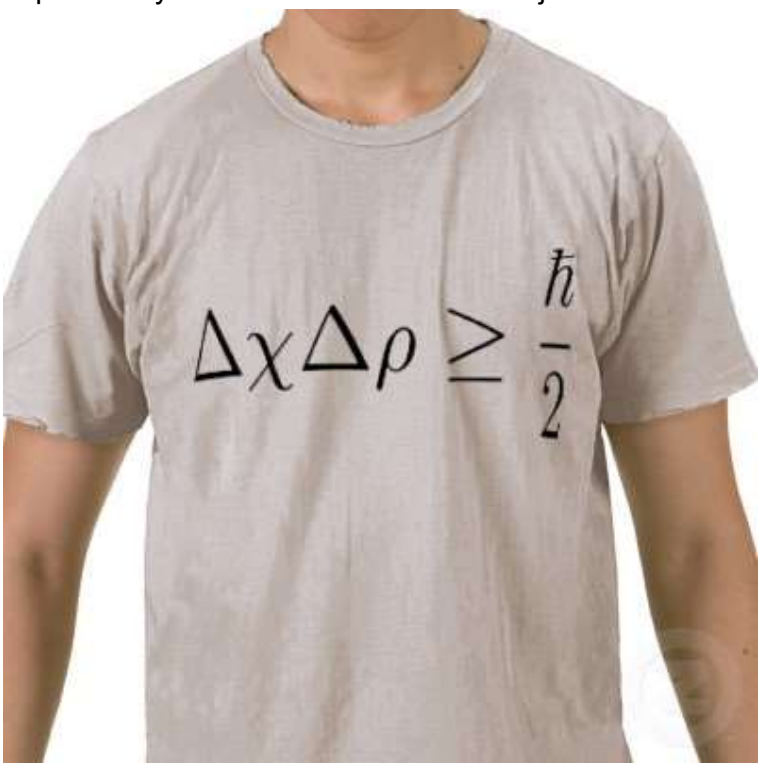
5.- ¿Qué nuevo estado de la materia se puede crear?

Debate 20. Principio de indeterminación de Heisenberg

- Principio de Incertidumbre de Heisenberg https://www.youtube.com/watch?v=LfLmzt2dn9M
- HOY SÍ que vas a entender el PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE https://www.youtube.com/watch?v=JnEAMYltzi0&t=4s 15:02
- El Principio de Incertidumbre tiene un Nombre de 💩

https://www.youtube.com/watch?v=2W8i-BVWehc&t=7s 7:25

En mecánica cuántica el principio de indeterminación de Heisenberg o principio de incertidumbre de Heisenberg afirma que no se puede determinar, simultáneamente y con precisión arbitraria, ciertos pares de variables físicas, como son, por ejemplo, la posición y el momento lineal de un objeto dado.



Explicación Matemática

En espacios de dimensión infinita, como los espacios de Hilbert que aparecen en mecánica cuántica, un operador puede ser hermítico pero no autoadjunto (aunque todos los operadores autoadjuntos son evidentemente hermíticos). El interés de los operadores en mecánica cuántica reside en que en la formulación de Dirac von-Neumann, los posibles valores de los observables físicos o magnitudes físicas, son precisamente de los autovalores de ciertos operadores que representan la magnitud física. Así pues el que un operador pueda ser interpretado como una magnitud físicamente medible requiere que sus autovalores sean números reales, condición que queda garantizada si los observables se representan por operadores hermíticos.

Todos los operadores importantes de la mecánica cuántica como la posición, el momento, el momento angular, la energía o el espín se representan como operadores autoadjuntos en un dominio denso de un espacio de Hilbert.

Un teorema de importancia capital en la mecánica cuántica es el que sigue: «Si y solo si dos operadores conmutan, tienen un conjunto de funciones propias en común». Si para una dirección espacial dada (x), se tienen dos operadores (magnitudes) como los operadores posición y momento lineal que no conmutan, esto implica que no tienen ninguna función propia en común. Así pues, para cualquier función de ondas, si es posible determinar de forma reproducible la posición, en la determinación del momento lineal habrá siempre una contribución estadística. Esto es la base del principio de indeterminación de Heisenberg. El principio de incertidumbre se da por la no conmutación de los operadores posición y momento, o energía y tiempo.

Explicación Cualitativa

Se puede entender mejor este principio si pensamos en lo que sería la medida de la posición y velocidad de un electrón: para realizar la medida (para poder «ver» de algún modo el electrón) es necesario que un fotón de luz choque con el electrón, con lo cual está modificando su posición y velocidad; es decir, por el mismo hecho de realizar la medida, el experimentador modifica los datos de algún modo, introduciendo un error que es imposible de reducir a cero, por muy perfectos que sean nuestros instrumentos.

No obstante hay que recordar que el principio de incertidumbre es inherente al universo, no al experimento ni a la sensibilidad del instrumento de medida. Surge como necesidad al desarrollar la teoría cuántica y se corrobora experimentalmente. No perdamos de vista que lo dicho en el párrafo anterior es un símil pero no se puede tomar como explicación del principio de incertidumbre

Consecuencias del Principio

Este Principio supone un cambio básico en nuestra forma de estudiar la Naturaleza, ya que se pasa de un conocimiento teóricamente exacto (o al menos, que en teoría podría llegar a ser exacto con el tiempo) a un conocimiento basado sólo en probabilidades y en la imposibilidad teórica de superar nunca un cierto nivel de error. El principio de indeterminación es un resultado teórico entre magnitudes conjugadas (posición – momento, energía-tiempo, etcétera).

Un error muy común es decir que el principio de incertidumbre impide conocer con infinita precisión la posición de una partícula o su cantidad de movimiento. Esto es falso. El principio de incertidumbre nos dice que no podemos medir simultáneamente y con infinita precisión un par de magnitudes conjugadas.

Es decir, nada impide que midamos con precisión infinita la posición de una partícula, pero al hacerlo tenemos infinita incertidumbre sobre su momento. Por ejemplo, podemos hacer un montaje como el del experimento de Young y justo a la

salida de las rendijas colocamos una pantalla fosforescente de modo que al impactar la partícula se marca su posición con un puntito. Esto se puede hacer, pero hemos perdido toda la información relativa a la velocidad de dicha partícula.

Por otra parte, las partículas en física cuántica no siguen trayectorias bien definidas. No es posible conocer el valor de las magnitudes físicas que describen a la partícula antes de ser medidas. Por lo tanto es falso asignarle una trayectoria a una partícula. Todo lo más que podemos es decir que hay una determinada probabilidad de que la partícula se encuentre en una posición más o menos determinada.

El principio de incertidumbre fue descubierto por Heisenberg en 1927 y es fundamental en física cuántica. Establece que $\Delta p \Delta x \geq h$ donde Δp es la incertidumbre en conocer el momento de la partícula (momento igual a masa por velocidad), Δx es la incertidumbre en conocer la posición de la partícula y h es la constante de Planck ($h=6.63\times10^{-34}Js$). Las implicaciones de esta sencilla fórmula son enormes. Si conocemos de forma muy precisa la posición de la partícula no podremos conocer de forma tan precisa su velocidad y viceversa independientemente de lo bueno que sea nuestro aparato de medida o de lo que nos esforcemos en ello. La incertidumbre en el sistema es intrínseca y no puede desaparecer nunca. Posteriormente a la propuesta de Heisenberg se dedujo su principio de la hipótesis onda-corpúsculo de De Broglie.

Cuestionario:

1.- Hallar la longitud de onda de De Broglie de un protón de 1 MeV.

2.- Para indagar la estructura interna de los núcleos atómicos se utilizan haces de electrones muy energéticos. Si el tamaño del núcleo atómico es del orden de 10^{14} m ´¿Cuál debe ser la energía de los electrones para que tengan asociada una longitud de onda del orden de 10^{15} m, que sean capaces de revelar detalles de la estructura interna de los núcleos atómicos?.

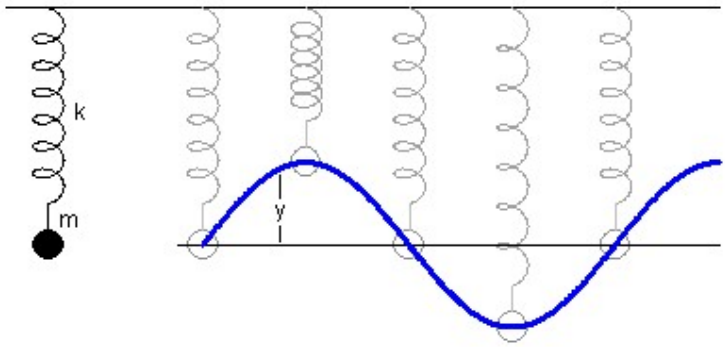
3.- Un microscopio electrónico utiliza electrones de 40 KeV. Determinar su poder de resolución suponiendo que ésta es igual a la longitud de onda de los electrones.

Debate 21. Oscilador Armónico

- Lo que Necesitas Saber sobre Ondas https://www.youtube.com/watch?v=rKf92Vgx2ag&t=1s 12:58
- Movimiento armónico simple (M.A.S.). Introducción y ecuación de posición https://www.youtube.com/watch?v=E5MjWFiPUfI 24:00
- El oscilador armónico mecano-cuántico https://www.youtube.com/watch?v=9A0yICtKlkg 7:30

Oscilador armónico

Se dice que un sistema cualquiera, mecánico, eléctrico, neumático, etc., es un oscilador armónico si, cuando se deja en libertad fuera de su posición de equilibrio, vuelve hacia ella describiendo oscilaciones sinusoidales, o sinusoidales amortiguadas en torno a dicha posición estable.



El ejemplo es el de una masa colgada en un resorte. Cuando se aleja la masa de su posición de reposo, el resorte ejerce sobre la masa una fuerza que es proporcional al desequilibrio (distancia a la posición de reposo) y que está dirigida hacia la posición de equilibrio. Si se suelta la masa, la fuerza del resorte acelera la masa hacia la posición de equilibrio. A medida que la masa se acerca a la posición de equilibrio y que aumenta su velocidad, la energía potencial elástica del resorte se transforma en energía cinética de la masa. Cuando la masa llega a su posición de equilibrio, la fuerza será cero, pero como la masa está en movimiento, continuará y pasará del otro lado. La fuerza se invierte y comienza a frenar la masa. La energía cinética de la masa va transformándose ahora en energía potencial del resorte hasta que la masa

se para. Entonces este proceso vuelve a producirse en dirección opuesta completando una oscilación.

Si toda la energía cinética se transforma en energía potencial y viceversa, la oscilación seguiría eternamente con la misma amplitud. En realidad, siempre hay una parte de la energía que se transforma en otra forma, debido a la viscosidad del aire o porque el resorte no es perfectamente elástico. Así pues, la amplitud del movimiento disminuirá más o menos lentamente con el paso del tiempo. Se empezará tratando el caso ideal, en el cual no hay pérdidas. Se analizará el caso unidimensional de un único oscilador.

Se denominará y a la distancia entre la posición de equilibrio y la masa, a la que se le dominara m. Se supone que la fuerza del resorte es estrictamente proporcional al desequilibrio: $F=-ky$ (ley de Hooke). F es la fuerza y k la constante elástica del resorte. El signo negativo indica que cuando es positiva la fuerza está dirigida hacia las negativas.

La segunda ley de Newton nos dice:

$$F = ma = m\frac{dv}{dt} = m\frac{d^2y}{dt^2}$$

reemplazando la fuerza obtenemos:

$$m\frac{d^2y}{dt^2} = -ky$$

La solución de esta ecuación diferencial ordinaria es inmediata: las únicas funciones reales (no complejas) cuya segunda derivada es la misma función con el signo invertido son seno y coseno. Las dos funciones corresponden al mismo movimiento. Escogemos arbitrariamente "coseno". La solución se escribe:

$y = A\cos(\omega t + \phi)$Símbolo Nombre

Elongación o diferencia respecto al estado de equilibrio
Amplitud, máxima diferencia respecto a la posición de equilibrio
Pulsación (o frecuencia angular)
Frecuencia
Tiempo
Fase inicial (para)

$\omega = 2\pi f$

Es fácil comprobar que el valor de w es: $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ El período de oscilación es: $T = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}$ Como ya hemos dicho, durante un cuarto de una oscilación la energía potencial se transforma en energía cinética. Durante otro cuarto, la energía cinética se transforma en energía potencial. En la figura de la derecha se ha trazado la posición en función del tiempo (curva de arriba), la velocidad en función del tiempo (en medio) y las energías potenciales y cinéticas (abajo).

Oscilador armónico amortiguado

Es el caso de rozamientos secos: la fuerza no depende ni de la velocidad ni de la posición. Otra situación que se produce en la realidad es que la fuerza sea proporcional a la velocidad elevada a una potencia, entera o no. Así sucede cuando la fuerza que frena proviene de la viscosidad o de las pérdidas aerodinámicas. Se tratará únicamente el caso más simple, es decir, cuando la fuerza sea proporcional a la velocidad. En este caso la fuerza será:

$$F_f = -bv = -b\frac{dy}{dt}$$

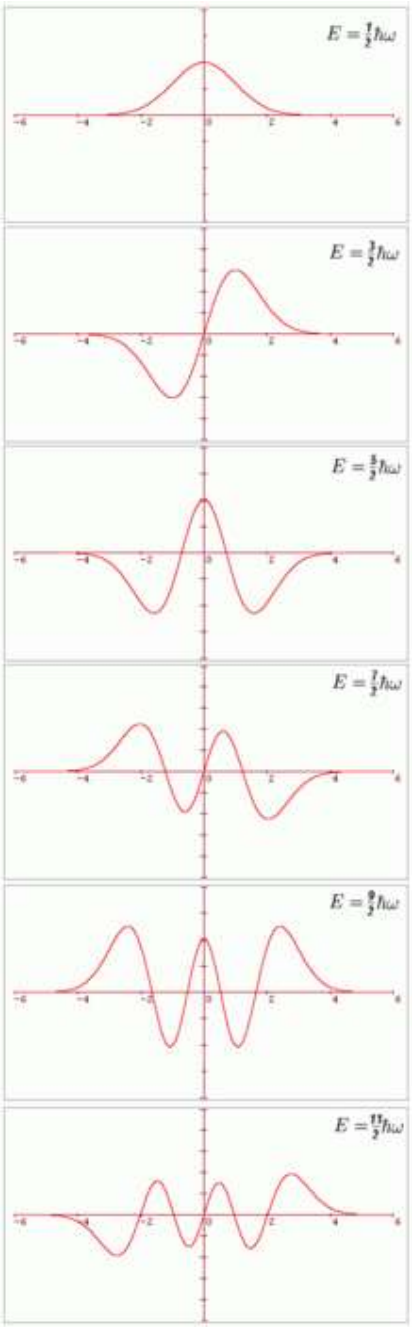
Donde b es un coeficiente que mide el amortiguamiento debido a la viscosidad. Si {\displaystyle \scriptstyle {b}} es pequeño, el sistema está poco amortiguado. Nótese el signo negativo que indica, como antes, que si la velocidad es positiva, la fuerza tiene la dirección superior opuesta a la velocidad de la partícula. Con este término complementario la ecuación diferencial del sistema es:

$$m\frac{d^2y}{dt^2} = -ky - b\frac{dy}{dt}$$

Se trata de una ecuación diferencial ordinaria, lineal, de segundo orden 1 (contiene derivadas segundas) y homogénea(no hay término independiente de y). Tiene tres tipos de soluciones según el valor de $b^2 - 4km$

1. Si $b^2 - 4km > 0$ el sistema está sobreamortiguado (amortiguamiento fuerte o supercrítico)
2. Si $b^2 - 4km = 0$ el sistema tiene amortiguamiento crítico.
3. Si $b^2 - 4km < 0$ el sistema oscila con amplitud decreciente (amortiguamiento débil o subcrítico)

Oscilador armónico cuántico



Funciones de onda para los primeros seis autoestados, n = 0 a 5. El eje horizontal muestra la posición y en unidades (h/2πmω)1/2. Las gráficas están sin normalizar.

Densidades de probabilidad de los primeros autoestados (dimensión vertical, con los de menor energía en la parte inferior) para las diferentes localizaciones espaciales (dimensión horizontal).

El oscilador armónico se puede emplear para estudiar sistemas que realicen pequeñas oscilaciones en torno a una posición de equilibrio. En particular, el oscilador armónico cuántico se puede emplear para estudiar las oscilaciones de los átomos de una molécula diatómica, como la de hidrógeno, H2, o la de cloruro de hidrógeno, HCl.

El oscilador armónico es uno de los casos en los que se puede obtener una solución analítica sencilla de la ecuación de Schrödinger. En esta situación, el hamiltoniano de la partícula considerada estará descrito por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2$$

Nótese que para el caso de moléculas diatómicas, la masa m sería, en realidad, la masa reducida del sistema. Se ve claramente que el primer sumando es un término cinético, mientras que el segundo es el armónico. Como el hamiltoniano no depende del tiempo, sólo resta resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, a fin de hallarlos autoestados de la energía E:

$$\hat{H}|\psi(y)\rangle = E|\psi(y)\rangle$$

Se puede demostrar que las funciones de onda, $\psi(y)$, cuyo módulo al cuadrado describe la densidad de probabilidad de que la partícula tenga una determinada posición y, son el producto de exponenciales por los polinomios de Hermite. La figura de la derecha muestra la forma de dichas funciones para los seis autoestados con energía más baja (el estado de menor energía es el que figura en la parte superior de la misma). En particular, la energía del nivel n-ésimo será:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

donde ħ es la constante de Planck.

Es importante señalar un par de hechos:

- Los niveles de energía se encuentran cuantizados, es decir, sólo pueden tomar una serie de valores discretos.
- El nivel mínimo de energía no es cero, sino (½)ħw. Nótese que la función de onda de dicho estado muestra que la partícula no se encuentra en todo momento en la posición de equilibrio y=0.

En la segunda figura, se muestran las densidades de probabilidad espacial de la partícula para los diferentes autoestados. Nótese que a medida que crece la energía del autoestado considerado (es decir, el orden n), las distribuciones de probabilidad tienden a concentrarse en los puntos de retorno, o máxima amplitud. Esta situación es la que se da en el caso clásico, si se define para él una densidad de probabilidad inversamente proporcional a la velocidad de la partícula en cada punto. Por tanto, se cumple el principio de correspondencia (es decir, se pueden predecir los resultados que se obtendrían en el límite clásico).

Cuestionario:

1.- ¿Qué es una función de onda?

2.- ¿Qué es un oscilador armónico clásico?

3.- ¿Qué es el oscilador armónico cuántico?

Debate 22. Interpretación de la función de onda

Función de onda

Función de onda para una partícula bidimensional encerrada en una caja. Las líneas de nivel sobre el plano inferior están relacionadas con la probabilidad de presencia.

En mecánica cuántica, una función de onda $\psi(\mathbf{x}, t)$ es una forma de representar el estado físico de un sistema de partículas. Usualmente es una función compleja, de cuadrado integrable y univaluada de las coordenadas espaciales de cada una de las partículas. Las propiedades mencionadas de la función de onda permiten interpretarla como una función de cuadrado integrable. La ecuación de Schrödinger proporciona una ecuación determinista para explicar la evolución temporal de la función de onda y, por tanto, del estado físico del sistema en el intervalo comprendido entre dos medidas (cuando se hace una medida, de acuerdo con el postulado IV, la evolución no es determinista).

Históricamente el concepto función de onda fue desarrollado en el marco de la primera física cuántica, donde se interpretaba que las partículas podían ser representadas mediante una onda física que se propaga en el espacio. En la formulación moderna, la función de onda se interpreta como un objeto mucho más abstracto, que representa un elemento de un cierto espacio de Hilbert de dimensión infinita que agrupa a los posibles estados del sistema.

Onda plana

En la física de propagación de ondas (especialmente en campos y ondas electromagnéticas), una onda plana o también llamada onda monodimensional, es una onda de frecuencia constante cuyos frentes de onda (superficies con fase constante) son planos paralelos de amplitud constante normales al vector velocidad de fase. Es decir, son aquellas ondas que se propagan en una sola dirección a lo largo del espacio, como por ejemplo las ondas en los muelles o en las cuerdas. Si la onda se propaga en una dirección única, sus frentes de ondas son planos y paralelos.

Por extensión, el término es también utilizado para describir ondas que son aproximadamente planas en una región localizada del espacio. Por ejemplo, una fuente de ondas electromagnéticas como una antena produce un campo que es aproximadamente plano en una región de campo lejano. Es decir que, a una distancia muy alejada de la fuente, las ondas emitidas son aproximadamente planas y pueden considerarse como tal.

Expresión matemática de la onda plana

Matemáticamente, una onda plana es una solución de la ecuación de onda en su forma compleja de la siguiente forma:

$u(\vec{x},t) = ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$

dónde i es la unidad imaginaria, k es el vector de onda, ω es la frecuencia angular y a es la amplitud compleja. La solución física es usualmente encontrada tomando la parte real de la expresión.
Esta es la solución para una ecuación de onda escalar en un medio homogéneo. Para ecuaciones de onda vectoriales, como las que describen a la radiación electromagnética o las ondas en un medio elástico, la solución para un medio homogéneo es similar:$e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$ multiplicado por un vector constante a. (Por ejemplo, en electromagnetismo a es típicamente el vector para el campo eléctrico, campo magnético, o el potencial vectorial). Una onda transversal es aquella en que el vector amplitud es ortogonal a k (por ejemplo, para ondas electromagnéticas en un medio isotrópico), mientras que una onda longitudinal es aquella en que el vector

amplitud es paralelo a k (por ejemplo en ondas acústicas propagándose en un gas o fluido).

En esta ecuación, la función ω(k) es la relación de dispersión del medio, con el radio ω/|k| dando la magnitud de la velocidad de fase y dω/dk dando la velocidad de grupo. Para el electromagnetismo en un medio isotrópico con índice de refracción n, la velocidad de fase es c/n (la cual iguala a la velocidad de grupo solamente si el índice no depende de la frecuencia).

Se dice que una onda plana electromagnética es uniforme si en ella, las intensidades de campo eléctrico y magnético presentan amplitudes constantes en las superficies equifase. Ondas de este tipo sólo pueden encontrarse en el espacio libre a una distancia infinita de la fuente.

NORMALIZACIÓN;

Una función de onda normalizable es una solución de la ecuación de Schrödinger tal que la integral de su módulo al cuadrado es finita. Cuando esto sucede el estado cuántico caracterizado por dicha función de onda es interpretable como una partícula localizada.

Por ejemplo los sistemas de partículas ligados por interacciones cuyo movimiento está siempre dentro de una región finita del espacio se pueden describir mediante funciones de onda normalizables, así los electrones ligados de un átomo o una molécula se describen mediante funciones de onda normalizada y también los nucleones dentro del núcleo atómico. Sin embargo, existen estados físicamente realistas como las partículas en colisión que no admiten una función de onda normalizable y que usualmente cuando fuera de la zona donde se produce la colisión o interacción vienen descritos como funciones de tipo "onda plana" y en general no resultan funciones de onda normalizables.

Normalización de funciones de onda

De acuerdo con la interpretación probabilística de la función de onda, $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r}$ representa la probabilidad de encontrar la partícula, en el instante t, en el elemento de volumen **dr** en torno al punto **r**. Como consecuencia, la probabilidad de encontrar la partícula en todo el espacio será la unidad y, por tanto

$$\int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = 1$$

donde la integración se extiende a todo el espacio. Esta condición significa que las funciones de onda que representan una partícula localizada en una región del

espacio finita tienen que ser de cuadrado integrable. Conviene expresar la condición de normalización anterior en la notación de Dirac,
$\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 1$

El hecho de que la ecuación de Schrödinger en la representación de posición sea una ecuación diferencial homogénea implica que si $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ es una solución, entonces $|\Psi(t)\rangle := N|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ también lo es. Podemos utilizar la constante de normalización N para conseguir que se cumpla la condición de normalización (2). En efecto, en este caso tendremos que elegir N para que se cumpla

$$|N|^2\langle \tilde{\Psi}(t)|\tilde{\Psi}(t)\rangle = 1 \rightarrow |N| = \frac{1}{\sqrt{\langle \tilde{\Psi}(t)|\tilde{\Psi}(t)\rangle}}$$

de tal manera que $N|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ represente la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en **r**.

Formulación original de Schrödinger-De Broglie

En 1923 De Broglie propuso la llamada hipótesis de De Broglie por la que a cualquier partícula podía asignársele un paquete de ondas materiales o superposición de ondas de frecuencia y longitud de onda asociada con el momento lineal y la energía:

$$\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} = \hbar\mathbf{k} \qquad E_k = h\nu = \hbar\omega$$

donde p, E_k son el momento lineal y la energía cinética de la partícula, y k,w son el vector número de onda y la frecuencia angular. Cuando se consideran partículas macroscópicas muy localizadas, el paquete de ondas se restringe casi por completo a la región del espacio ocupada por la partícula y, en ese caso, la velocidad de movimiento de la partícula no coincide con la velocidad de fase de la onda sino con la velocidad de grupo del paquete:

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\partial E_k}{\partial p} = \frac{\partial E_k(p)}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

donde $E_k(p) = p^2/2m$Si en lugar de las expresiones clásicas del momento lineal y la energía se usan las expresiones relativistas, lo cual da una descripción más precisa para partículas rápidas, un cálculo algo más largo, basado en la velocidad de grupo, lleva a la misma conclusión.

La fórmula de De Broglie encontró confirmación experimental en 1927 en un experimento que probó que la ley de Bragg, inicialmente formulada para rayos X y radiación de alta frecuencia, era también válida para electrones lentos si se usaba como longitud de onda la longitud postulada por De Broglie. Esos hechos llevaron a los físicos a tratar de formular una ecuación de ondas cuántica que en el límite

clásico macroscópico se redujera a las ecuaciones de movimiento clásicas o leyes de Newton. Dicha ecuación ondulatoria había sido formulada por Erwin Schrödinger en 1925 y es la celebrada Ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x},t)+V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x},t)=i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{x},t)}{\partial t}$$

donde $\psi(\mathbf{x},t)$ se interpretó originalmente como un campo físico o campo de materia que por razones históricas se llamó función de onda y fue el precedente histórico del moderno concepto de función de onda.

El concepto actual de función de onda es causa de debate en la Física actual, sobre todo en lo que respecta la realidad objetiva e intrínseca de dicha función de onda. Matemáticamente, la implicación del cuadrado de la función de onda es la amplitud de la probabilidad de presencia de materia. Esta interpretación, introducida por Max Born, le valió la concesión del premio Nobel de física en 1954.

Cuestionario:

1.- ¿Que es una onda Plana?

2.- ¿Cómo Normalizas una función de Onda?

Debate 23. Función de Onda. Ecuación de Schrodinger

Función de onda

En mecánica cuántica, una función de onda $\psi(\mathbf{x},t)$ es una forma de representar el estado físico de un sistema de partículas. Usualmente es una función compleja, de cuadrado integrable y univaluada de las coordenadas espaciales de cada una de las partículas. Las propiedades mencionadas de la función de onda permiten interpretarla como una función de cuadrado integrable. La ecuación de Schrödinger proporciona una ecuación determinista para explicar la evolución temporal de la función de onda y, por tanto, del estado físico del sistema en el intervalo comprendido entre dos medidas (cuando se hace una medida, de acuerdo con el postulado IV, la evolución no es determinista).

Función de onda

- La función de onda viene dada por:

$$y(x,t) = A\sin\left[\frac{2\pi}{\lambda}(x \mp vt)\right]$$
$$y(x,t) = A\sin(kx \mp \omega t + \delta)$$
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \omega = \frac{2\pi}{T}$$

  - El signo "-" corresponde a una onda moviéndose a la derecha, mientras que el signo "+" corresponde a una onda moviéndose a la izquierda.

Ondas transversales 18

Históricamente el concepto función de onda fue desarrollado en el marco de la primera física cuántica, donde se interpretaba que las partículas podían ser representadas mediante una onda física que se propaga en el espacio. En la formulación moderna, la función de onda se interpreta como un objeto mucho más abstracto, que representa un elemento de un cierto espacio de Hilbert de dimensión infinita que agrupa a los posibles estados del sistema.

Formulación original de Schrödinger-De Broglie

En 1923 De Broglie propuso la llamada hipótesis de De Broglie por la que a cualquier partícula podía asignársele un paquete de ondas materiales o superposición de ondas de frecuencia y longitud de onda asociada con el momento lineal y la energía:

$$\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} = \hbar\mathbf{k} \qquad E_k = h\nu = \hbar\omega$$

donde p ,E_k son el momento lineal y la energía cinética de la partícula, y k ,w son el vector número de onda y la frecuencia angular. Cuando se consideran partículas macroscópicas muy localizadas, el paquete de ondas se restringe casi por completo a la región del espacio ocupada por la partícula y, en ese caso, la velocidad de movimiento de la partícula no coincide con la velocidad de fase de la onda sino con la velocidad de grupo del paquete:

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial E_k}{\partial p} = \frac{\partial E_k(p)}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

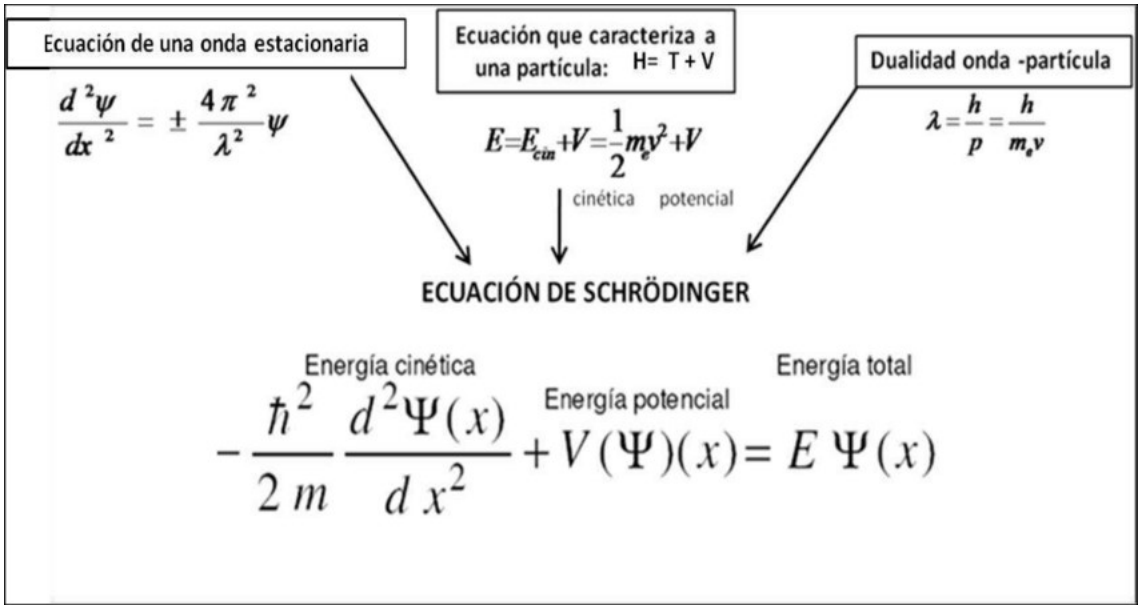
donde $E_k(p) = p^2/2m$. Si en lugar de las expresiones clásicas del momento lineal y la energía se usan las expresiones relativistas, lo cual da una descripción más precisa para partículas rápidas, un cálculo algo más largo, basado en la velocidad de grupo, lleva a la misma conclusión.

La fórmula de De Broglie encontró confirmación experimental en 1927 en un experimento que probó que la ley de Bragg, inicialmente formulada para rayos X y radiación de alta frecuencia, era también válida para electrones lentos si se usaba como longitud de onda la longitud postulada por De Broglie. Esos hechos llevaron a los físicos a tratar de formular una ecuación de ondas cuántica que en el límite clásico macroscópico se redujera a las ecuaciones de movimiento clásicas o leyes de Newton. Dicha ecuación ondulatoria había sido formulada por Erwin Schrödinger en 1925 y es la celebrada Ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x},t) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{x},t)}{\partial t}$$

donde $\psi(\mathbf{x},t)$ se interpretó originalmente como un campo físico o campo de materia que por razones históricas se llamó función de onda y fue el precedente histórico del moderno concepto de función de onda.

El concepto actual de función de onda es causa de debate en la Física actual, sobre todo en lo que respecta la realidad objetiva e intrínseca de dicha función de onda. Matemáticamente, la implicación del cuadrado de la función de onda es la amplitud de la probabilidad de presencia de materia. Esta interpretación, introducida por Max Born, le valió la concesión del premio Nobel de física en 1954.



La ecuación de onda es el ejemplo prototipo de una ecuación hiperbólica en derivadas parciales. La ecuación de onda escalar hace referencia a la variación de una función escalar u = u (x1, x2, x3; t) dependiente del tiempo t y de una o más variables espaciales x1, x2, x3. La cantidad u puede ser, por ejemplo, una variación de presión del medio en el que se propaga la onda; también puede ser el desplazamiento, respecto a sus posiciones de equilibrio, de las partículas del gas, líquido o sólido al propagarse la onda. La función u satisface:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \Delta u = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2} \right)$$

Donde $\Delta \equiv \nabla^2$ es el laplaciano y donde c es una constante que representa la velocidad de propagación de la onda. Para una onda sonora en el aire a 20 °C, esta constante es de cerca de 343 m/s (véase velocidad del sonido). Para una cuerda vibrante, la velocidad puede variar mucho dependiendo de la densidad lineal de la cuerda y su tensión. Para un resorte de espiral (un Slinky) puede ser tan lento como un metro por segundo.

Un modelo más realista de la ecuación diferencial para ondas permite que la velocidad de propagación de la onda varíe con la frecuencia de la onda, a este fenómeno se le conoce como dispersión. En este caso, deberá ser reemplazado por la velocidad de fase:

$$v_{\mathrm{p}} = \frac{\omega}{k}.$$

Otra corrección común en sistemas realistas es que la velocidad puede depender también de la amplitud de la onda, lo que nos lleva a una ecuación de onda no lineal:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c(u)^2 \Delta u$$

También hay que considerar que una onda puede ser transmitida en un portador móvil (por ejemplo, la propagación del sonido en el flujo de un gas). En tal caso el escalar u contendrá un número Mach (el cual es positivo para la onda que se mueva a lo largo del flujo y negativo para la onda reflejada).

La ecuación de onda elástica en tres dimensiones describe la propagación de onda en un medio elástico homogéneo isótropo. La mayoría de los materiales sólidos son elásticos, por lo que esa ecuación describe fenómenos tales como ondas sísmicas en la Tierra y las ondas de ultrasonido usadas para determinar defectos en los materiales. Aunque sea lineal, esta ecuación tiene una forma más compleja que las ecuaciones dadas arriba, porque debe tomar en cuenta los movimientos longitudinales y transversales:

$$\rho\ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{f} + (\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \mu\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})$$

Donde:

λ y μ son los supuestos parámetros de Lamé que describen las propiedades elásticas del medio.
ρ es la densidad,
f es la función de entrada (fuerza motriz),
y u es el desplazamiento.

Note que en esta ecuación, la fuerza y el desplazamiento son cantidades vectoriales. Esta ecuación es conocida a veces como la ecuación de onda vectorial.

Hay variaciones de la ecuación de onda que también pueden ser encontradas en mecánica cuántica y relatividad general.

- La ecuación de Schrödinger
  https://www.youtube.com/watch?v=8VaLdRwVVoI
- MECÁNICA CUÁNTICA - La Interpretación de Copenhague
  https://www.youtube.com/watch?v=GZJR_01QhGY
- Función de onda cuántica
  https://www.youtube.com/watch?v=lKbUG3VvUDQ&t=52s
- MECÁNICA CUÁNTICA - La Interpretación de Copenhague

https://www.youtube.com/watch?v=GZJR_01QhGY&t=12s

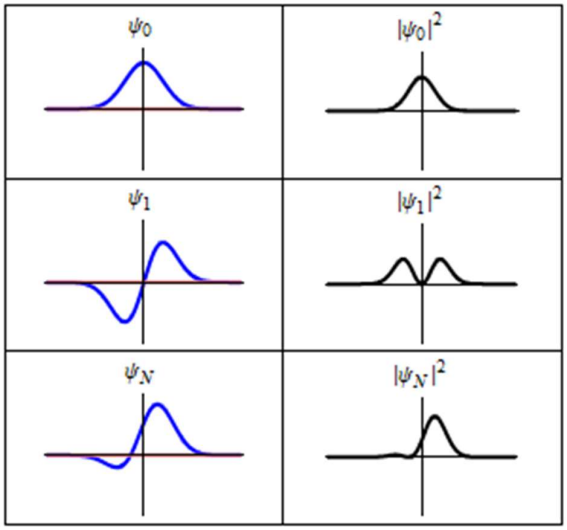
Cuestionario:

1.- ¿Que establece el principio de Correspondencia?

2.- ¿Qué dice exactamente la ecuación de Schrodinger?

Debate 24. Función de Onda y probabilidad

Una función de onda que satisface la ecuación no relativista de Schrödinger con V = 0. Es decir, corresponde a una partícula viajando libremente a través del espacio libre. Este gráfico es la parte real de la función de onda.



Cada una de las tres filas es una función de onda que satisfacen la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un oscilador armónico cuántico. A la izquierda: La parte real (azul) y la parte imaginaria (rojo) de la función de onda. A la derecha: La distribución de probabilidad de hallar una partícula con esta función de onda en una posición determinada. Las dos filas de arriba son ejemplos de estados estacionarios, que corresponden a ondas estacionarias. La fila de abajo es un ejemplo de un estado que no es estacionario. La columna de la derecha ilustra por qué el estado puede llamarse "estacionario".

Ecuación dependiente del tiempo

La forma de la ecuación de Schrödinger depende de la situación física. La forma más general es la ecuación dependiente del tiempo, la cual describe un sistema que evoluciona con el paso del tiempo:

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo *(general)*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r},t)$$

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (general)

donde i es la unidad imaginaria, ħ es la «constante de Planck reducida» o «constante de Dirac» (constante de Planck dividida por 2π), el símbolo ∂/∂t indica una derivada parcial con respecto al tiempo t, Ψ (la letra griega psi) es la función de onda del sistema cuántico, y Ĥ es el operador Hamiltoniano (el cual caracteriza la energía total de cualquier función de onda dada y tiene diferentes formas que dependen de la situación).

El ejemplo más famoso es la ecuación de Schrödinger no relativista para una partícula simple moviéndose en un campo eléctrico (pero no en un campo magnético; ver la ecuación de Pauli):

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo *(partícula simple no relativista)*

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

donde μ es la "masa reducida" de la partícula, V es su energía potencial, ∇2 es el Laplaciano (un operador diferencial), y Ψ es la función de onda (más precisamente,

en este contexto, se la denomina "función de onda posición-espacio"). Es decir, significa que la "energía total es igual a la energía cinética más la energía potencial".

Según los operadores diferenciales que se utilizan, se observa que es una ecuación diferencial en derivadas parciales lineal. También es un caso de una ecuación de difusión, pero no como la ecuación del calor, ya que también es una ecuación de onda dada por unidad imaginaria presente en el término de transitorio.

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \nabla^2 u = 0$$

El término "ecuación de Schrödinger" puede referirse a la ecuación general (la primera de arriba), o la versión específica no relativista (la segunda y sus variantes). La ecuación general se usa en toda la mecánica cuántica, desde la ecuación de Dirac hasta la teoría de campos cuánticos, mediante la utilización de expresiones complicadas para el Hamiltoniano. La versión no relativista específica es una aproximación simplificada a la realidad, la cual tiene bastante precisión en muchas situaciones, pero muy imprecisa en muchas otras (ver mecánica cuántica relativista y teoría cuántica de campos relativista).

Para aplicar la ecuación de Schrödinger, se utiliza para el sistema el operador Hamiltoniano, tomado en cuenta las energías cinética y potencial de las partículas que constituyen el sistema, y luego insertadas en la ecuación de Schrödinger. La ecuación en derivadas parciales resultante se resuelve para la función de onda, la cual contiene información acerca del sistema.

Ecuación independiente del tiempo

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo predice que las funciones de onda pueden tener la forma de ondas estacionarias, denominados estados estacionarios (también llamados "orbitales", como en los orbitales atómicos o los orbitales moleculares). Estos estados son importantes, y si los estados estacionarios se clasifican y se pueden comprender, entonces es más fácil de resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para cualquier estado. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es la ecuación que describe los estados estacionarios. (Solo se utiliza cuando el Hamiltoniano no es dependiente del tiempo. Sin embargo, en cada uno de estos casos la función de onda total seguirá dependiente del tiempo.)

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (*general*)

$$E\Psi = \hat{H}\Psi$$

Es decir, la ecuación dice que:

Cuando el operador Hamiltoniano actúa sobre cierta función de onda Ψ, y el resultado es proporcional a la misma función de onda Ψ, entonces Ψ es un estado estacionario, y la constante de proporcionalidad, E, es la energía del estado Ψ. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, en terminología de álgebra lineal, es una ecuación con autovalores. Una conocida aplicación, es la ecuación de Schrödinger no relativista para una partícula simple moviéndose en un campo eléctrico (pero no en uno magnético):

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (*partícula simple no relativista*)

$$E\Psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{r})$$

La derivación histórica

El esquema conceptual utilizado por Schrödinger para derivar su ecuación reposa sobre una analogía formal entre la óptica y la mecánica:

En la óptica ondulatoria, la ecuación de propagación en un medio transparente de índice real n variando lentamente a la escala de la longitud de onda conduce —mientras se busca una solución monocromática donde la amplitud varía muy lentamente ante la fase— a una ecuación aproximada denominada eikonal. Es la aproximación de la óptica geométrica, a la cual está asociada el principio variacional de Fermat.

En la formulación hamiltoniana de la mecánica clásica, existe una ecuación de Hamilton-Jacobi (que en última instancia es equivalente a las leyes de Newton). Para una partícula masiva no relativista sometida a una fuerza que deriva de una energía potencial, la energía mecánica total es constante y la ecuación de Hamilton-Jacobi para la ”función característica de Hamilton” se parece formalmente a la ecuación de la eikonal (el principio variacional asociado es el principio de mínima acción.)

Este paralelismo lo había notado ya Hamilton en 1834, pero el no tenía una razón para dudar de la validez de la mecánica clásica. Después de la hipótesis de De

Broglie de 1923, Schrödinger dice: la ecuación de la eikonal siendo una aproximación a la ecuación de onda de la óptica ondulatoria, buscamos la ecuación de onda de la "mecánica ondulatoria" (a realizar) donde la aproximación será la ecuación de Hamilton-Jacobi. Lo que falta, primero para una onda estacionaria (E = cte), después para una onda de cualquier tipo.n.

Schrödinger había en efecto comenzado por tratar el caso de una partícula relativista —como de Broglie antes que él—. Entonces había obtenido la ecuación conocida hoy día con el nombre de Klein-Gordon, pero su aplicación al caso del potencial eléctrico del átomo de hidrógeno daba unos niveles de energía incompatibles con los resultados experimentales. Ello hará que se concentre sobre el caso no-relativista, con el éxito conocido.

Formulación moderna de la ecuación

En mecánica cuántica, el estado en el instante t de un sistema se describe por un elemento del espacio complejo de Hilbert — usando la notación bra-ket de Paul Dirac. Las probabilidades de resultados de todas las medidas posibles de un sistema pueden obtenerse a partir de $|\Psi(t)\rangle$. La evolución temporal de $|\Psi(t)\rangle$ se describe por la ecuación de Schrödinger :

$$\hat{\mathbf{H}}\,|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}\,|\Psi(t)\rangle = \frac{\hat{\vec{\mathbf{p}}}^{\,2}}{2m}\,|\Psi(t)\rangle + V(\hat{\vec{\mathbf{r}}},t)\,|\Psi(t)\rangle$$

donde
pV
i : es la unidad Imaginaria ;
ħ,: es la constante de Planck normalizada (h/2π) ;
Ĥ,: es el hamiltoniano, dependiente del tiempo en general, el observable corresponde a la energía total del sistema ;
$\hat{\vec{\mathbf{r}}}$,: es el observable posición ;
$\hat{\vec{\mathbf{p}}}$: es el impulso observable.
V,: es la energía potencial

Como con la fuerza en la segunda ley de Newton, su forma exacta no da la ecuación de Schrödinger, y ha de ser determinada independientemente, a partir de las propiedades físicas del sistema cuántico.

Debe notarse que, contrariamente a las ecuaciones de Maxwell que describen la evolución de las ondas electromagnéticas, la ecuación de Schrödinger es no

relativista. Nótese también que esta ecuación no se demuestra: es un postulado. Se supone correcta después de que Davisson y Germer confirmaron experimentalmente la hipótesis de Louis de Broglie. Para más información del papel de los operadores en mecánica cuántica, véase la formulación matemática de la mecánica cuántica.

Recordemos que

■■ Una partícula es descrita por su función de onda compleja. El cuadrado absoluto de la función de onda compleja es la probabilidad de encontrar una partícula en alguna posición. La integral del cuadrado de la función de onda a lo largo de todo el espacio es igual a 1.

■■ La ecuación de Schrödinger es la ecuación de onda no relativa para una partícula en un potencial U(x).

■■ Ecuaciones de onda que son soluciones para el problema de una partícula limitada a un pozo de potencial infinito son funciones sinusoidales. Los valores de energía de las soluciones son proporcionales al cuadrado del número cuántico de la solución. Las soluciones para el problema de un potencial de altura infinita tienen colas exponenciales que alcanzan la región clásicamente prohibida.

■■ Si una partícula encuentra una barrera de potencial de altura y ancho finitos, podrá abrir un túnel a través de esta barrera, incluso si tiene menos energía que la altura de la barrera. La probabilidad de que esta partícula abra un túnel a través de la barrera depende en forma exponencial del ancho de la barrera.

■■ Las soluciones de la función de onda para el potencial del oscilador armónico son polinomios de Hermite. Los correspondientes valores propios de energía están igualmente espaciados. Funciones de onda de osciladores con n = 0 tienen el producto mínimo de incertidumbre de la cantidad de movimiento y posición permitido por el principio de incertidumbre.

■■ El principio de correspondencia declara que si la diferencia de energía DELTA E entre estados de energía adyacentes se vuelve pequeña en relación con la energía total E, la solución cuántica se acerca a su límite clásico.

■■ El operador hamiltoniano (o simplemente abreviado, el hamiltoniano) es el operador de la energía total. Este operador es lineal. Por lo tanto, una combinación lineal de dos soluciones de la ecuación de Schrödinger, que se basa en el hamiltoniano, también es una solución.

■■ La función de onda de dos partículas para bosones (no interactuando) es el producto simetrizado de funciones de onda de una partícula, y la función de onda de dos partículas para fermiones (no interactuando) es el producto antisimetrizado.

Revisar el siguiente LINK.
Contiene todos los temas del curso de Física cuántica
http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/quacon.html#quacon

Y este otro para el tema de hoy
http://www.fisicacuantica.es/la-funcion-de-onda-y-su-interpretacion/

Ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger, desarrollada por el físico austríaco Erwin Schrödinger en 1925, describe la evolución temporal de una partícula subatómica masiva de naturaleza ondulatoria y no relativista. Es de importancia central en la teoría de la mecánica cuántica, donde representa para las partículas microscópicas un papel análogo a la segunda ley de Newton en la mecánica clásica. Las partículas microscópicas incluyen a las partículas elementales, tales como electrones, así como sistemas de partículas, tales como núcleos atómicos.

Interpretación estadística de la función de onda

A principios de la década de 1930 Max Born que había trabajado junto con Werner Heisenberg y Pascual Jordan en una versión de la mecánica cuántica basada en el formalismo matricial alternativa a la de Heisenberg apreció que la ecuación de Schrödinger compleja tiene una integral de movimiento dada por que podía ser interpretada como una densidad de probabilidad. Born le dio a la función de onda una interpretación probabilística diferente de la que De Broglie y Schrödinger le habían dado, y por ese trabajo recibió el premio Nobel en 1954. Born ya había apreciado en su trabajo mediante el formalismo matricial de la mecánica cuántica que el conjunto de estados cuánticos llevaba de manera natural a construir espacios de Hilbert para representar los estados físicos de un sistema cuántico.

De ese modo se abandonó el enfoque de la función de onda como una onda material, y pasó a interpretarse de modo más abstracto como una amplitud de probabilidad. En la moderna mecánica cuántica, el conjunto de todos los estados posibles en un sistema se describe por un espacio de Hilbert complejo y separable, y cualquier estado instantáneo de un sistema se describe por un "vector unitario" en ese espacio (o más bien una clase de equivalencia de vectores unitarios). Este "vector unitario" codifica las probabilidades de los resultados de todas las posibles

medidas hechas al sistema. Como el estado del sistema generalmente cambia con el tiempo, el vector estado es una función del tiempo. Sin embargo, debe recordarse que los valores de un vector de estado son diferentes para distintas localizaciones, en otras palabras, también es una función de x (o, tridimensionalmente, de r). La ecuación de Schrödinger da una descripción cuantitativa de la tasa de cambio en el vector estado.

http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/quantum/schr.html

Cuestionario:

1.-¿ Que es un oscilador armónico Clásico?

2.- ¿Qué es un oscilador armónico Cuántico?

Debate 25. Cantidad de movimiento y energía cinética.

La cantidad de movimiento, momento lineal, ímpetu o momentum es una magnitud física derivada de tipo vectorial que describe el movimiento de un cuerpo en cualquier teoría mecánica. En mecánica clásica, la cantidad de movimiento se define como el producto de la masa del cuerpo y su velocidad en un instante determinado. Históricamente, el concepto se remonta a Galileo Galilei. En su obra Discursos y demostraciones matemáticas en torno a dos nuevas ciencias, usa el término italiano impeto, mientras que Isaac Newton en Principia Mathematica usa el término latino motus1 (movimiento) y vis motrix (fuerza motriz).

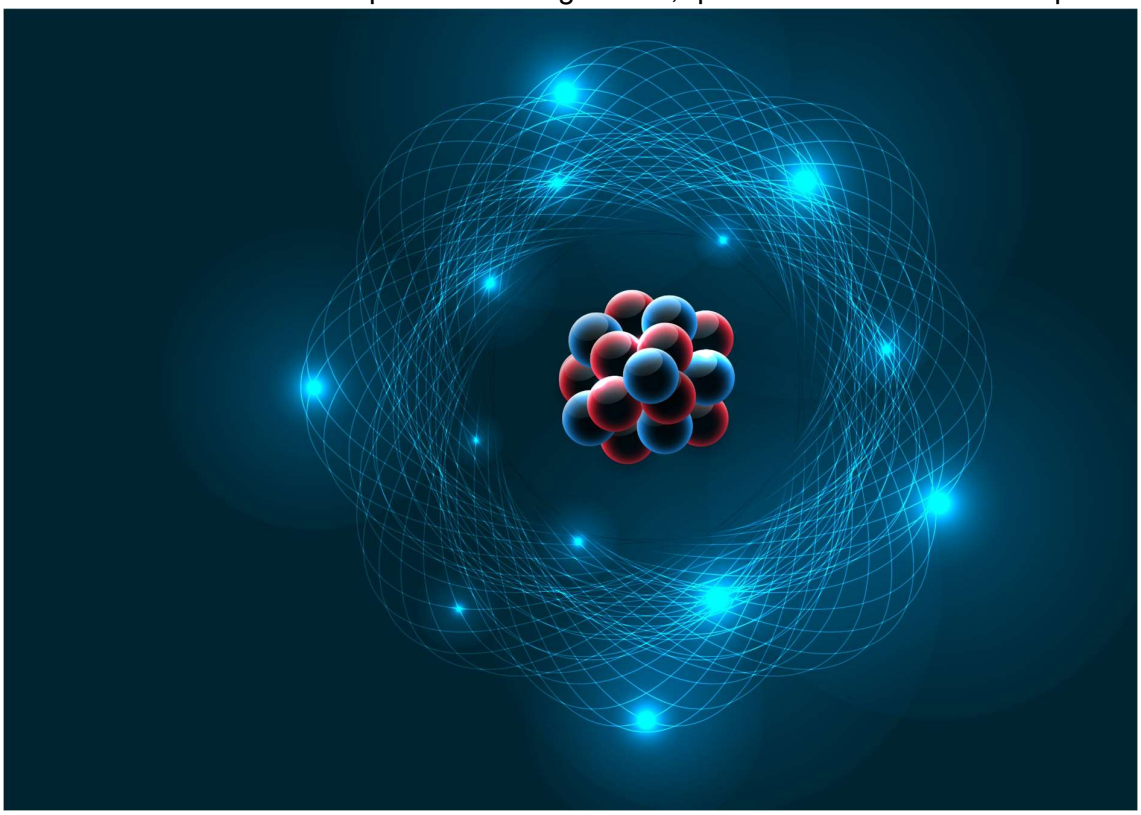
La definición concreta de cantidad de movimiento difiere de una formulación mecánica a otra: en mecánica newtoniana se define para una partícula simplemente como el producto de su masa por la velocidad, en la mecánica lagrangiana o hamiltoniana se admiten formas más complicadas en sistemas de coordenadas no cartesianas, en la teoría de la relatividad la definición es más compleja aun cuando se usan sistemas inerciales, y en mecánica cuántica su definición requiere el uso de operadores autoadjuntos definidos sobre un espacio vectorial de dimensión infinita.

En mecánica newtoniana, la forma más usual de introducir la cantidad de movimiento es como el producto de la masa (kg) de un cuerpo material por su

velocidad (m/s), para luego analizar su relación con las leyes de Newton. No obstante, tras el desarrollo de la física moderna, esta manera de operar no resultó ser la más conveniente para abordar esta magnitud fundamental. Una diferencia importante es que esta definición newtoniana solo se tiene en cuenta el concepto inherente a la magnitud, que resulta ser una propiedad de cualquier ente físico con o sin masa, necesaria para describir las interacciones. Los modelos actuales consideran que no solo los cuerpos másicos poseen cantidad de movimiento, también resulta ser un atributo de los campos y los fotones.

La cantidad de movimiento obedece a una ley de conservación, lo cual significa que la cantidad de movimiento total de todo sistema cerrado (o sea uno que no es afectado por fuerzas exteriores, y cuyas fuerzas internas no son disipadoras) no puede ser cambiada y permanece constante en el tiempo.

En el enfoque geométrico de la mecánica relativista la definición es algo diferente. Además, el concepto de momento lineal puede definirse para entidades físicas como los fotones o los campos electromagnéticos, que carecen de masa en reposo.



Cantidad de movimiento en mecánica clásica

Mecánica newtoniana

Históricamente el concepto de cantidad de movimiento surgió en el contexto de la mecánica newtoniana en estrecha relación con el concepto de velocidad y el de masa. En mecánica newtoniana se define la cantidad de movimiento lineal como el producto de la masa por su velocidad:

$$\mathbf{p} = m.\mathbf{v}$$

La idea intuitiva tras esta definición está en que la "cantidad de movimiento" dependía tanto de la masa como de la velocidad: si se imagina una mosca y un camión, ambos moviéndose a 40 Km/h , la experiencia cotidiana dice que la mosca es fácil de detener con la mano mientras que el camión no, aunque los dos vayan a la misma velocidad. Esta intuición llevó a definir una magnitud que fuera proporcional tanto a la masa del objeto móvil como a su velocidad.

Mecánica lagrangiana y hamiltoniana

En las formulaciones más abstractas de la mecánica clásica, como la mecánica lagrangiana y la mecánica hamiltoniana, además del momento lineal y del momento angular se pueden definir otros momentos, llamados momentos generalizados o momentos conjugados, asociados a cualquier tipo de coordenada generalizada. Se generaliza así la noción de momento.

Si se tiene un sistema mecánico definido por su lagrangiano L definido en términos de las coordenadas generalizadas (q1,q2, …,qN) y las velocidades generalizadas, entonces el momento conjugado de la coordenada qi viene dado por:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}.$$

Cuando la coordenada qi es una de las coordenadas de un sistema de coordenadas cartesianas, el momento conjugado coincide con una de las componentes del momento lineal, y, cuando la coordenada generalizada representa una coordenada angular o la medida de un ángulo, el momento conjugado correspondiente resulta ser una de las componentes del momento angular.

Cantidad de movimiento de un medio continuo

Si estamos interesados en averiguar la cantidad de movimiento de, por ejemplo, un fluido que se mueve según un campo de velocidades es necesario sumar la cantidad de movimiento de cada partícula del fluido, es decir, de cada diferencial de masa o elemento infinitesimal:

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{v}\, dm = \int_V \mathbf{v}\, \rho dV.$$

Cantidad de movimiento en mecánica relativista

La constancia de la velocidad de la luz en todos los sistemas inerciales tiene como consecuencia que la fuerza aplicada y la aceleración adquirida por un cuerpo material no sean colineales en general, por lo cual la ley de Newton expresada como F=ma no es la más adecuada. La ley fundamental de la mecánica relativista aceptada es F=dp/dt.

El principio de relatividad establece que las leyes de la física conserven su forma en los sistemas inerciales (los fenómenos siguen las mismas leyes). Aplicando este principio en la ley F=dp/dt se obtiene el concepto de masa relativista, variable con la velocidad del cuerpo, si se mantiene la definición clásica (newtoniana) de la cantidad de movimiento.

En el enfoque geométrico de la mecánica relativista, puesto que el intervalo de tiempo efectivo percibido por una partícula que se mueve con respecto a un observador difiere del tiempo medido por el observador. Eso hace que la derivada temporal del momento lineal respecto a la coordenada temporal del observador inercial y la fuerza medida por él no coincidan. Para que la fuerza sea la derivada temporal del momento es necesario emplear la derivada temporal respecto al tiempo propio de la partícula. Eso conduce a redefinir la cantidad de movimiento en términos de la masa y la velocidad medida por el observador con la corrección asociada a la dilatación de tiempo experimentada por la partícula. Así, la expresión relativista de la cantidad de movimiento de una partícula medida por un observador inercial viene dada por:

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \gamma m\mathbf{v}$$

donde v^2, c^2 son respectivamente el módulo al cuadrado de la velocidad de la partícula y la velocidad de la luz al cuadrado y γ es el factor de Lorentz.
Además, en mecánica relativista, cuando se consideran diferentes observadores en diversos estados de movimiento surge el problema de relacionar los valores de las medidas realizadas por ambos. Eso solo es posible si en lugar de considerar vectores tridimensionales se consideran cuadrivectores que incluyan coordenadas espaciales y temporales. Así, el momento lineal definido anteriormente junto con la energía constituye el cuadrivector momento-energía o cuadrimomento P:

$$\mathbf{P} = (P^0, P^1, P^2, P^3) = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z\right)$$

Los cuadrimomentos definidos como en la última expresión medidos por dos observadores inerciales se relacionarán mediante las ecuaciones suministradas por las transformaciones de Lorentz.

Cantidad de movimiento en mecánica cuántica

La mecánica cuántica postula que a cada magnitud física observable m, le corresponde un operador lineal autoadjunto $\hat{m}$llamado simplemente "observable", definido sobre un dominio de espacio de Hilbert abstracto. Este espacio de Hilbert representa cada uno de los posibles estados físicos que puede presentar un determinado sistema cuántico.

Aunque existen diversas maneras de construir un operador asociado a la cantidad de movimiento, la forma más frecuente es usar como espacio de Hilbert para una partícula el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$y usar una representación de los estados cuánticos como funciones de onda. En ese caso, las componentes cartesianas del momento lineal se definen como:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

Resulta interesante advertir que dichos operadores son autoadjuntos solo sobre el espacio de funciones absolutamente continuas de $L^2(\mathbb{R}^3)$ que constituyen un dominio denso de dicho espacio. Cuidado con esto, pues los autovalores del operador momento, salvo que nos limitemos a $L^2(\mathbb{R}^3)$,no tienen por qué ser reales. De hecho, en general pueden ser complejos.

Cuestionario:

1.- ¿Qué es cantidad de movimiento?

2.- Investiga y describe que es un espacio de Hilbert.

3.- Explica que entiendes por Mecánica lagrangiana y hamiltoniana

Debate 26. Energía Cinética y Energía Potencial.

Energía cinética

Hemos visto que podemos introducir un operador de cantidad de movimiento y aplicarlo a la función de onda cuántica de una partícula a fin de encontrar su cantidad de movimiento. ¿Existen otros operadores que pueden aplicarse a funciones de onda para encontrar las cantidades clásicas equivalentes? Una de estas cantidades clásicas es la energía cinética de una partícula. Clásicamente, la energía cinética se puede escribir como $K = p^2/2m$, así que, siguiendo la idea de la ecuación 37.6, introducimos un operador para la energía cinética como

$$\mathbf{K}\psi(x) = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2\psi(x) = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)^2\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x). \tag{37.7}$$

Esta ecuación se puede entender como la definición general del operador de energía cinética. ¿Qué pasa para el caso especial en el que este operador se aplica a la función de onda de una partícula de libre movimiento con una cantidad de movimiento $p = \hbar\kappa$, una que tiene una función de onda $\psi(x) = Ae^{i\kappa x}$? Esto nos da

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}Ae^{i\kappa x} = -i\kappa\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}Ae^{i\kappa x} = \kappa^2\frac{\hbar^2}{2m}Ae^{i\kappa x} = \frac{p^2}{2m}Ae^{i\kappa x} = KAe^{i\kappa x}.$$

En efecto, esto funciona como se advirtió. El operador de energía cinética aplicado a la función de onda de una partícula libre produce esta energía cinética. Observe que la inserción de la función de onda $\psi(x) = Be^{-i\kappa x}$ hubiera resultado en el mismo valor para la energía cinética porque $(-\kappa)^2 = \kappa^2$. Por lo tanto, para la superposición de una onda que se mueve hacia la izquierda y hacia la derecha con un número de onda κ, el operador de energía cinética aplicado a la función de onda de la ecuación 37.3 resulta en

$$\mathbf{K}(Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}) = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}). \tag{37.8}$$

Cantidad de movimiento en mecánica cuántica

La mecánica cuántica postula que a cada magnitud física observable m, le corresponde un operador lineal autoadjunto $\hat{m}$llamado simplemente "observable", definido sobre un dominio de espacio de Hilbert abstracto. Este espacio de Hilbert representa cada uno de los posibles estados físicos que puede presentar un determinado sistema cuántico.

Aunque existen diversas maneras de construir un operador asociado a la cantidad de movimiento, la forma más frecuente es usar como espacio de Hilbert para una partícula el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$y usar una representación de los estados cuánticos como funciones de onda. En ese caso, las componentes cartesianas del momento lineal se definen como:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

Resulta interesante advertir que dichos operadores son autoadjuntos solo sobre el espacio de funciones absolutamente continuas de $L^2(\mathbb{R}^3)$ que constituyen un dominio denso de dicho espacio. Cuidado con esto, pues los autovalores del

operador momento, salvo que nos limitemos a $L^2(\mathbb{R}^3)$,no tienen por qué ser reales. De hecho, en general pueden ser complejos.

Cuestionario:

1.- Describe la ecuación de onda,

2.- Describe qué es cantidad de movimiento

3.- ¿Cómo describes la Energía Cinética?

Debate 27. Ecuación de Schrodinger

37.2 Ecuación de Schrödinger

Dado que un electrón se puede representar por una función de onda, ¿cuál es la ecuación de movimiento que describe cuando esta función de onda depende de espacio y tiempo? Tal ecuación nos daría soluciones para la función de onda que son consistentes con las observaciones que hasta ahora se han analizado en este capítulo. Particularmente, las soluciones deberán tener longitudes de onda de De Broglie del tipo que se encuentran en el capítulo 36, y los cuadrados absolutos de las soluciones deberán reproducir los resultados del experimento de dispersión de doble rendija. El físico austriaco Erwin Schrödinger (1887-1961) encontró una de estas ecuaciones en 1925 y ahora lleva su nombre. Es el fundamento para toda la mecánica cuántica no relativista. Con "no relativista" nos referimos a todos los casos físicos en los que las velocidades de los objetos son pequeñas en comparación con la velocidad de la luz, así que la energía cinética se puede escribir

Partiendo de casos de simple limitación de cero energía potencial y energía potencial infinita, se pueden construir soluciones de la función de onda más complicadas para distribuciones de energía potencial. A fin de encontrar la solución para estas funciones de onda, tenemos que recordar que

- la función de onda debe ser continua en el espacio (es decir, no debe hacer ningún "salto", lo que crearía posiciones en las que las derivadas de la función de onda son indefinidas);
- la función de onda debe ser cero en regiones con energía potencial infinita, como dijimos antes, y
- la función de onda es normalizada (es decir, cumple con la condición de normalización de la ecuación 37.2).

como $p^2/2m$. La siguiente discusión aplica la ecuación de Schrödinger a los electrones, pero la ecuación de Schrödinger también es válida para cualquier otro objeto que convencionalmente sea considerado como una partícula.

Por ahora consideramos únicamente problemas unidimensionales para investigar su solución estática; es decir, sus soluciones independientemente del tiempo. La **ecuación de Schrödinger** para este caso es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x). \tag{37.9}$$

En esta ecuación $U(x)$ representa la energía potencial, que puede ser diferente para posiciones distintas, y E es la energía mecánica total de la onda. Ya hemos introducido el primer término en esta ecuación como el operador de la energía cinética, así que podemos pensar en la ecuación de Schrödinger como una expresión de la ley de conservación de energía para nuestra función de onda,

$$\Big(K(x)+U(x)\Big)\psi(x)=E\psi(x).$$

Si la energía potencial es cero en todas partes, entonces $U(x) = 0$ y la energía total es igual a la energía cinética. Para este caso ya hemos encontrado la solución, porque la ecuación de Schrödinger se reduce entonces simplemente a la ecuación 37.8. En la ausencia de una energía potencial, la solución de la ecuación de Schrödinger es, por ende, $\psi(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}$.

¿Cuál es la solución para una energía potencial muy grande? A físicos como nosotros nos gusta usar el límite de una energía potencial *infinita* a fin de obtener una solución simple. Para una energía potencial infinita en algún punto en el espacio, la ecuación de Schrödinger demanda que ya sea que la energía E sea infinita o la función de onda tenga el valor de cero en esta posición. No estamos interesados en el caso de energía infinita no física, así que la función de onda tiene que ser cero en esta región. Por lo tanto, es físicamente imposible que una partícula se encuentre en una región con energía potencial infinita. Llamamos a esta zona la región prohibida.

Cuestionario

1.-¿ Qué es un oscilador armónico cuántico?

2.- Describe el funcionamiento del principio del microscopio de escaneo de efecto túnel STM.

3.- ¿Qué es el efecto túnel?

Debate 28. Ecuación de Schrodinger independiente del tiempo

37.2 Ecuación de Schrödinger

Dado que un electrón se puede representar por una función de onda, ¿cuál es la ecuación de movimiento que describe cuando esta función de onda depende de espacio y tiempo? Tal ecuación nos daría soluciones para la función de onda que son consistentes con las observaciones que hasta ahora se han analizado en este capítulo. Particularmente, las soluciones deberán tener longitudes de onda de De Broglie del tipo que se encuentran en el capítulo 36, y los cuadrados absolutos de las soluciones deberán reproducir los resultados del experimento de dispersión de doble rendija. El físico austriaco Erwin Schrödinger (1887-1961) encontró una de estas ecuaciones en 1925 y ahora lleva su nombre. Es el fundamento para toda la mecánica cuántica no relativista. Con "no relativista" nos referimos a todos los casos físicos en los que las velocidades de los objetos son pequeñas en comparación con la velocidad de la luz, así que la energía cinética se puede escribir como $p^2/2m$. La siguiente discusión aplica la ecuación de Schrödinger a los electrones, pero la ecuación de Schrödinger también es válida para cualquier otro objeto que convencionalmente sea considerado como una partícula.

Por ahora consideramos únicamente problemas unidimensionales para investigar su solución estática; es decir, sus soluciones independientemente del tiempo. La **ecuación de Schrödinger** para este caso es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x). \tag{37.9}$$

En esta ecuación $U(x)$ representa la energía potencial, que puede ser diferente para posiciones distintas, y E es la energía mecánica total de la onda. Ya hemos introducido el primer término en esta ecuación como el operador de la energía cinética, así que podemos pensar en la ecuación de Schrödinger como una expresión de la ley de conservación de energía para nuestra función de onda,

$$\Big(K(x)+U(x)\Big)\psi(x)=E\psi(x).$$

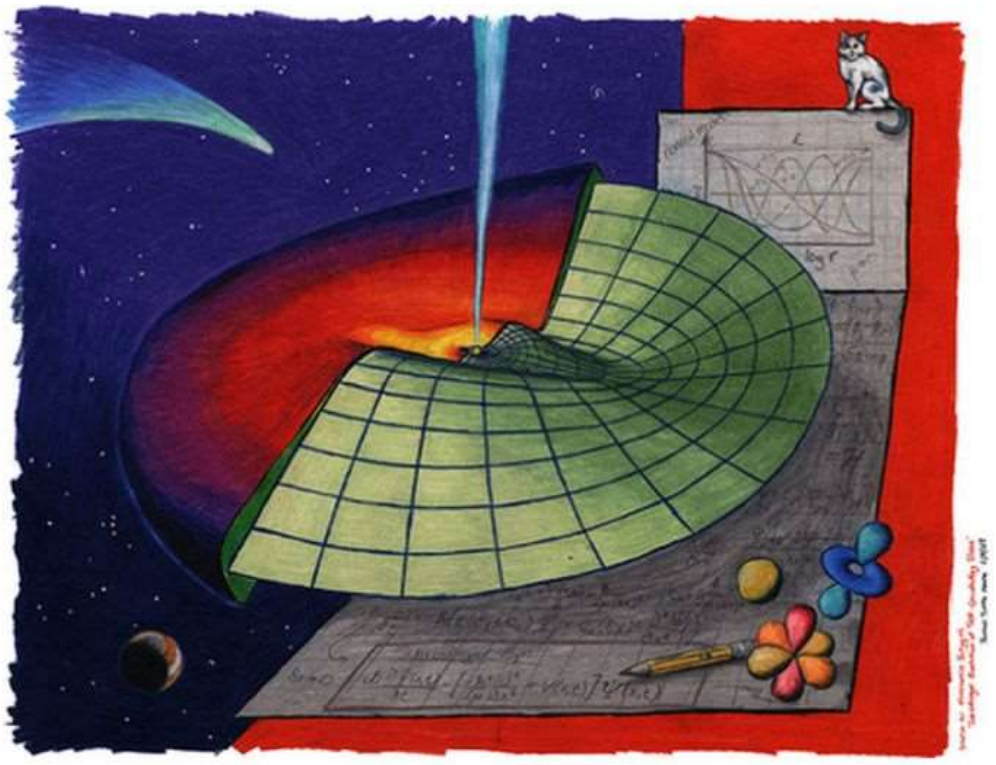
Si la energía potencial es cero en todas partes, entonces $U(x) = 0$ y la energía total es igual a la energía cinética. Para este caso ya hemos encontrado la solución, porque la ecuación de Schrödinger se reduce entonces simplemente a la ecuación 37.8. En la ausencia de una energía potencial, la solución de la ecuación de Schrödinger es, por ende, $\psi(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}$.

¿Cuál es la solución para una energía potencial muy grande? A físicos como nosotros nos gusta usar el límite de una energía potencial *infinita* a fin de obtener una solución simple. Para una energía potencial infinita en algún punto en el espacio, la ecuación de Schrödinger demanda que ya sea que la energía E sea infinita o la función de onda tenga el valor de cero en esta posición. No estamos interesados en el caso de energía infinita no física, así que la función de onda tiene que ser cero en esta región. Por lo tanto, es físicamente imposible que una partícula se encuentre en una región con energía potencial infinita. Llamamos a esta zona la región prohibida.

Partiendo de casos de simple limitación de cero energía potencial y energía potencial infinita, se pueden construir soluciones de la función de onda más complicadas para distribuciones de energía potencial. A fin de encontrar la solución para estas funciones de onda, tenemos que recordar que

- la función de onda debe ser continua en el espacio (es decir, no debe hacer ningún "salto", lo que crearía posiciones en las que las derivadas de la función de onda son indefinidas);
- la función de onda debe ser cero en regiones con energía potencial infinita, como dijimos antes, y
- la función de onda es normalizada (es decir, cumple con la condición de normalización de la ecuación 37.2).

La ecuación de Schrödinger explica también el comportamiento de ciertas estructuras cósmicas



La ecuación de Schrödinger resulta notablemente útil para describir la evolución a largo plazo de ciertas estructuras astronómicas. /Caltech

El del gato de Schrödinger es un experimento clásico de la mecánica cuántica ideado por Erwin Schrödinger en 1935, que propone que, si encierras

(hipotéticamente) a un gato en una caja con explosivos que tienen el 50% de probabilidades de detonar, hasta que abras la caj, el animal se encuentra en dos estados simultáneamente: muerto y vivo. Ahora, parece que esta ecuación, que es el fundamento de la mecánica cuántica, resulta notablemente útil también para describir la evolución a largo plazo de ciertas estructuras astronómicas, según un nuevo estudio publicado en Monthly Notices of the Royal Astronomical Society.

En concreto, dicha ecuación permite comprender la propagación de las ondas a través de un disco astrofísico. Los cuerpos astronómicos masivos suelen estar rodeados por grupos de objetos más pequeños que giran alrededor de ellos, como los planetas alrededor del sol. Por ejemplo, los agujeros negros supermasivos están rodeados por enjambres de estrellas, que a su vez están orbitados por enormes cantidades de rocas, hielo y otros desechos espaciales. Debido a las fuerzas gravitacionales, estos enormes volúmenes de material se convierten en discos planos y redondos, formados por innumerables partículas individuales que orbitan en masa.

Estos discos no suelen retener formas circulares simples a lo largo de sus vidas. En cambio, a lo largo de millones de años, evolucionan lentamente para exhibir distorsiones a gran escala, doblándose como ondas en un estanque. La manera en la que emergen y se propagan estas deformaciones ha desconcertado a los astrónomos, y ni las simulaciones de ordenador han logrado ofrecer una respuesta definitiva.

Mientras enseñaba un curso en el Instituto de Tecnología de California (Caltech, EE.UU.) sobre física planetaria, Konstantin Batygin, el teórico que propuso la existencia del Planeta Nueve, recurrió a un esquema de aproximación llamado Teoría de la perturbación para formular una representación matemática simple de la evolución del disco. Según estas ecuaciones, las partículas individuales se unen matemáticamente en cada trayectoria orbital particular. De esta forma, un disco se puede modelar como una serie de cables concéntricos que intercambian lentamente el momento angular orbital entre sí.

La ecuación de Schrödinger describe el comportamiento no intuitivo de los sistemas a escalas atómicas y subatómicas. Una de estas conductas no intuitivas es que las partículas subatómicas en realidad se comportan más como ondas que como partículas discretas, un fenómeno llamado dualidad onda-partícula. El trabajo de Batygin sugiere que las deformaciones a gran escala en discos astrofísicos se comportan de manera similar a las partículas, y la propagación de éstas dentro del material del disco puede describirse mediante las mismas matemáticas utilizadas para describir el comportamiento de una sola partícula cuántica si rebotaba entre los bordes interno y externo del disco.

La Ecuación de Schrödinger está bien estudiada, y, según los científicos, encontrar que una ecuación por excelencia es capaz de describir la evolución a largo plazo de los discos astrofísicos debería ser útil para los científicos que modelan tales fenómenos a gran escala.

Cuestionario:

1.- Describe la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo.

2.- Definir los siguientes conceptos;

a) Operadores cuánticos de posición,
b) Operador derivada,
c) Operador del momento lineal clásico y cuántico,
d) Operador energía potencial,
e) Operador Hamiltoniano.
f) Valores propios o eigenvalores.
g) Función de onda

Debate 29. Pozo de Potencial

youtube.com/watch?v=qg2GKg2w9zQ

Pozo de potencial infinito

Partícula en una caja

Función de onda para una partícula encerrada en una caja bidimensional, las líneas de nivel sobre el plano inferior están relacionadas con la probabilidad de presencia.

En física, la partícula en una caja (también conocida como pozo de potencial infinito) es un problema muy simple que consiste de una sola partícula que rebota dentro de una caja inmóvil de la cual no puede escapar, y donde no pierde energía al colisionar contra sus paredes. En mecánica clásica, la solución al problema es trivial: la partícula se mueve en una línea recta a una velocidad constante hasta que

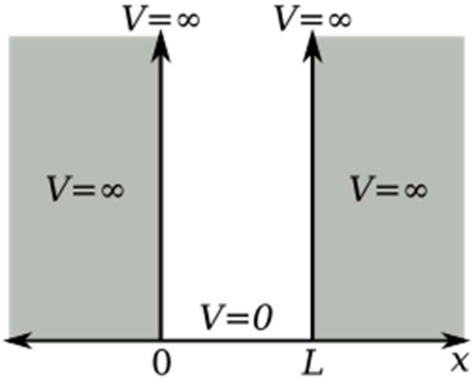
rebota en una de las paredes. Al rebotar, la velocidad cambia de sentido cambiando de signo la componente paralela a la dirección perpendicular a la pared y manteniéndose la velocidad paralela a la pared, sin embargo, no hay cambio en el módulo de la misma velocidad.

Descripción cuántica del problema

El problema se vuelve muy interesante cuando se intenta resolver dentro de la mecánica cuántica, ya que es necesario introducir muchos de los conceptos importantes de esta disciplina para encontrar una solución. Sin embargo, aun así es un problema simple con una solución definida. Este artículo se concentra en la solución dentro de la mecánica cuántica.

El problema puede plantearse en cualquier número de dimensiones, pero el más simple es el problema unidimensional, mientras que el más útil es el que se centra en una caja tridimensional. En una dimensión, se representa por una partícula que existe en un segmento de una línea, siendo las paredes los puntos finales del segmento.

En términos de la física, la partícula en una caja se define como una partícula puntual, encerrada en una caja donde no experimenta ningún tipo de fuerza (es decir, su energía potencial es constante, aunque sin pérdida de generalidad podemos considerar que vale cero). En las paredes de la caja, el potencial aumenta hasta un valor infinito, haciéndola impenetrable. Usando esta descripción en términos de potenciales nos permite usar la ecuación de Schrödinger para determinar una solución.



Esquema del potencial para la caja unidimensional.

Como se menciona más arriba, si estuviéramos estudiando el problema bajo las reglas de la mecánica clásica, deberíamos aplicar las leyes del movimiento de Newton a las condiciones iniciales, y el resultado sería razonable e intuitivo. En mecánica cuántica, cuando se aplica la ecuación de Schrödinger, los resultados no son intuitivos. En primer lugar, la partícula solo puede tener ciertos niveles de energía específicos, y el nivel cero no es uno de ellos. En segundo lugar, las

probabilidades de detectar la partícula dentro de la caja en cada nivel específico de energía no son uniformes - existen varias posiciones dentro de la caja donde la partícula puede ser encontrada, pero también hay posiciones donde es imposible hacerlo. Ambos resultados difieren de la manera usual en la que percibimos al mundo, incluso si están fundamentados por principios extensivamente verificados a través de experimentos.

Caja unidimensional

La versión más sencilla se da en la situación idealizada de una "caja monodimensional", en la que la partícula de masa m puede ocupar cualquier posición en el intervalo [0,L]. Para encontrar los posibles estados estacionarios es necesario plantear la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión para el problema. Considerando que el potencial es cero dentro de la caja e infinito fuera, la ecuación de Schrödinger dentro de la caja es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x) \quad \text{con} \quad 0 < x < L$$

con las siguientes condiciones de contorno, consecuencia que la función de onda se anula fuera de la caja

$$\begin{cases} \psi(0) = 0 \\ \psi(L) = 0 \end{cases}$$

y donde

$\hbar$ es la Constante de Planck,

m es la masa de la partícula,

$\psi(x)$ es la función de onda estacionaria independiente del tiempo que queremos obtener autofunciones y

E es la energía de la partícula (autovalor).

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \qquad E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 = \frac{h^2}{8mL^2}n^2, \qquad \text{con } n = 1, 2, 3, \ldots$$

Niveles de energía (líneas discontinuas) y funciones de onda (líneas continuas) de la partícula en una caja monodimensional.

Nótese que solo son posibles los niveles de energía "cuantizados". Además, como n no puede ser cero (ver más adelante), el menor valor de la energía tampoco puede serlo. Esta energía mínima se llama energía del punto cero y se justifica en términos del principio de incertidumbre. Debido a que la partícula se encuentra restringida a moverse en una región finita, la varianza de la posición tiene un límite superior (la longitud de la caja, L. Así, de acuerdo con el principio de incertidumbre, la varianza del momento de la partícula no puede ser cero y, por tanto, la partícula debe tener

una cierta cantidad de energía que aumenta cuando la longitud de la caja L disminuye.

Deducción

A continuación ilustramos la deducción de los anteriores valores de la energía y forma de las funciones de onda por su valor didáctico. La ecuación de Schrödinger anterior es una ecuación diferencial lineal de segundo orden con coeficientes constantes, cuya solución general es:

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \qquad \text{donde } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Donde, A y B son, en general, números complejos que deberán escogerse para cumplir las condiciones de contorno. Por otra parte el número k se conoce como número de onda y es un número real, al serlo E. Por otro lado, la solución particular del problema (1) se obtiene imponiendo las condiciones de contorno apropiadas, lo que permite obtener los valores de A y B. Si consideramos la primera de las condiciones de contorno, $\psi(0) = 0$, entonces$B = 0$ (debido a que $\sin(0) = 0$ y $\cos(0) = 1$). Por tanto, la función de onda debe de tener la forma:

$$\psi(x) = A\sin(kx)$$

en x=L se obtiene:

$$\psi(L) = A\sin(kL) = 0$$

La solución trivial es $A = 0$, que implica que $\psi = 0$ en cualquier lugar (es decir, la partícula no está en la caja). Si $A \neq 0$ entonces $\sin(kL) = 0$ si y solo si:

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad \text{donde} \quad n \in \mathbb{Z}^+$$

El valor n=0 se elimina porque, en este caso, $\psi = 0$ en cualquier lugar, lo que corresponde con el caso en el que la partícula no está en la caja. Los valores negativos también se omiten, debido a que la función de onda está definida salvo una fase consecuencia de que la densidad de probabilidad, representada por el cuadrado de la función de onda $\psi^*\psi$, es independiente del valor de dicha fase. En este caso, los valores negativos de n suponen un mero cambio de signo de $\sin(nx)$ y, por tanto, no representan nuevos estados.

El siguiente paso es obtener la constante A, para lo cual tenemos que normalizar la función de onda. Como sabemos que la partícula se encuentra en algún lugar del espacio, y como $|\psi(x)|^2$ representa la probabilidad de encontrar la partícula en un determinado punto del espacio (densidad de probabilidad), la integral de la densidad de probabilidad en todo el espacio x, debe de ser igual a 1:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = |A|^2 \int_0^L \sin^2(kx) \, \mathrm{d}x = |A|^2 \frac{L}{2} \qquad \Rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

De aquí se deduce que A es cualquier número complejo con valor absoluto $\sqrt{(2/L)}$ todos los valores diferentes de A proporcionan el mismo estado físico, por lo que elegiremos por simplicidad el valor real $A = \sqrt{(2/L)}$.

Por último, sustituyendo estos resultados en la solución general obtenemos el conjunto completo de autofunciones y energías para el problema de la partícula en una caja monodimensional, resumido en (1b).

Caja tridimensional ortoédrica

En esta sección consideraremos que el volumen encerrado por la caja en la que se mueve la partícula es un ortoedro de lados Lx, Ly y Lz, la elección de esa forma simplifica el problema concreto ya que podemos usar fácilmente las coordenadas cartesianas para resolver el problema. Los estados estacionarios de este sistema físico consistente en una partícula material atrapada en una caja son aquellos que satisfacen la ecuación de Schrödinger con las siguientes condiciones:

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \\ \\ \psi(0,y,z) = \psi(L_x,y,z) = 0 \qquad \psi(x,0,z) = \psi(x,L_y,z) = 0 \\ \psi(x,y,0) = \psi(x,y,L_z) = 0 \end{cases}$$

La función de onda fuera de la caja es cero expresando el hecho de que la probabilidad de encontrar la partícula fuera de una caja de la que la partícula no puede escapar es cero. Las soluciones de la ecuación (2) pueden encontrarse por el método de separación de variables y son de la forma:

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)$$

Donde n_x, n_y, n_z son números enteros, que llamaremos números cuánticos. Al igual que en el caso monodimensional, n_x, n_y, n_z > 0. Los valores posibles de la energía están cuantizados y vienen dados por:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$

Un caso interesante se produce cuando la caja tiene simetría. Por ejemplo, cuando dos o más lados son iguales, existen varias funciones de onda a las que les corresponde el mismo valor de la energía (se dice que los niveles de energía están degenerados). Por ejemplo, si $L_x = L_y$, entonces las funciones de onda con $n_x = 1, n_y = 2$ y $n_x = 2, n_y = 1$ están degeneradas en la energía. En este caso se dice que el nivel de energía está doblemente degenerado.

Cuestionario:

1. ¿Cómo se calcula la Energía de una partícula ?

Debate 30. Pozo de potencial

En 1924 Louis de Broglie sugirió que una partícula lleva asociada una onda. extendió la concepción dual onda-partícula de la luz a las partículas materiales como el electrón. Aquí surge el hecho de que la materia tiene propiedades corpusculares como la masa (m) carga (q) momentum (p= m.v) y propiedades ondulatorias. Afirmó que la longitud de onda (λ distancia entre dos ondas sucesivas) es inversamente proporcional al momento lineal (p=m.v ; producto de la masa y la velocidad) de la partícula proponiendo la expresión que lleva su nombre :

λ = h/p relación de De Broglie.

h es la constante de Planck (h =6,63x10^{-34} J.s). La relación de De Broglie muestra que cuanto mayor sea el momento lineal (p) de la partícula, menor será la longitud de onda (λ) de su función de onda.

La teoría unificadora de estas propiedades es la teoría cuántica cuya ecuación propuesta por E. Schrodinger incluye la dualidad onda-partícula de De Broglie.

Analizaremos y resolveremos la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo, para una partícula en una caja de potencial cero, para este propósito definiremos a la función de onda (ψ psi) describiremos a los operadores cuánticos, se obtendrán valores propios o eigenvalores, se normalizaran funciones y se establecerá la ecuación de Schrodinger para una y tres dimensiones. Un concepto fundamental de la mecánica cuántica es que la materia tiene propiedades ondulatorias. Significa que

una partícula como el electrón de un átomo se puede describir mediante una función matemática la función de onda (ψ psi). La función de onda describe la distribución de los electrones en los átomos, y por ello ocupa un lugar central en cualquier interpretación de las propiedades de los átomos y de los compuestos que forman.

La función de o las funciones de onda generalmente son funciones trigonométricas seno y coseno también hay funciones exponenciales (número e). Las funciones de onda generalmente son funciones trigonométricas seno y coseno también hay funciones exponenciales (número e).

El comportamiento de una onda puede expresarse como y = A Sen Bx haciendo uso de psi

Ψ = A Sen Bx; está es una expresión de la amplitud de una onda tipo seno desplazándose en dimensión x, A y B son constantes. Aquí se plantea lo interesante, el comportamiento de la materia se describe con una ecuación para ondas que puede ser Ψ = A Sen Bx.

La función de onda (ψ psi) describe el estado de un sistema, está funciones de onda deben cumplir requisitos matemáticos, deben ser funciones continuas, univaluadas (un solo valor f(x) para cada valor de x) y deben ser también diferenciables (derivables).

Algunos ejemplos de funciones de onda son:
Ψ = Sen x;
Ψ= Sen 2x;
Ψ= Cos x
Ψ = Cos x/4 ;
Ψ = ex ;
Ψ = e^{-4x}

37.3 Pozo de potencial infinito

Nuestro primer ejemplo de una distribución de energía potencial en el espacio es el de un **pozo de potencial infinito**. Esto es matemáticamente hablando el caso más simple y proporciona el entendimiento de interesantes situaciones físicas. Para un pozo de potencial infinito, defina la energía potencial como una función de la coordenada espacial x como

$$U(x)=\begin{cases}\infty & \text{para } x<0\\ 0 & \text{para } 0\le x\le a\\ \infty & \text{para } x>a.\end{cases} \tag{37.10}$$

Para este caso, el valor es cero para la función de onda para todos los valores fuera del intervalo de coordenadas espaciales entre 0 y a (figura 37.4). En particular, esto también implica un valor de 0 en los límites de intervalo. Dentro de este intervalo de coordenadas espaciales, la función de onda es del tipo que se encuentra en la ecuación 37.3, $\psi(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}$. Como se ha establecido antes, esta solución es matemáticamente equivalente a $\psi(x) = C\cos(\kappa x) + D\,\text{sen}(\kappa x)$. Esta forma de escribir la función de onda es ventajosa en este caso porque sabemos que $\psi(0) = 0$. Si sustituimos $x = 0$ en la función de onda nos da

$$\psi(0)=C\cos(\kappa\cdot 0)+D\,\text{sen}(\kappa\cdot 0)=C=0.$$

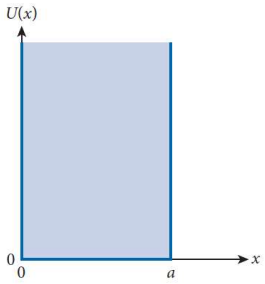


FIGURA 37.4 Un pozo de potencial infinito. La región permitida con valores no infinitos del potencial está sombreado en azul.

De este modo, el coeficiente C debe ser cero y el término de coseno no puede contribuir a la solución, dada la solución de $\psi(x) = D\,\text{sen}(\kappa x)$ en el intervalo entre 0 y a. Físicamente esto tiene sentido, porque la superposición de la onda que corre hacia la izquierda $Be^{-i\kappa x}$ y de la onda que corre hacia la derecha $Ae^{i\kappa x}$ resulta en una onda estacionaria, lo que es la solución apropiada para una onda atrapada entre dos barreras de potencial infinitamente altas.

Por lo tanto, nuestro resultado preliminar es que nuestra función de onda se puede escribir como

$$\psi(x)=\begin{cases}0 & \text{para } x<0\\ D\,\text{sen}(\kappa x) & \text{para } 0\le x\le a\\ 0 & \text{para } x>a.\end{cases}$$

Puesto que nuestras funciones de onda deben ser continuas, existen restricciones para posibles soluciones dentro del intervalo entre 0 y a, ya que sólo pueden usarse aquellas soluciones que desaparecen en los límites. En $x = 0$, esto sucede automáticamente porque la función seno siempre es 0 en este punto. Sin embargo, en $x = a$, la condición del límite es

$$\psi(x=a)=D\,\text{sen}(\kappa a)=0.$$

Esto implica que no todos los valores de la longitud de onda $\lambda = 2\pi/\kappa$ son posibles, sino solamente aquellos para los cuales se cumple

$$\kappa a=\frac{2\pi a}{\lambda}=n\pi \quad \text{para todo } n=1,2,3,...$$

porque la función seno es cero cada vez que su argumento es un número entero múltiplo de π. (Técnicamente, $n = 0$ también es permitido, pero para cualquier valor finito de a esto implica una longitud de onda infinita no física. También se permitirían números negativos, pero dado que $\text{sen}(-x) = -\text{sen}(x)$, éstos no nos dan soluciones adicionales más allá de las que ya están contenidas en los números enteros positivos.) Por ende, las posibles longitudes de onda en este pozo de potencial sólo son aquellas con

$$\lambda_n = \frac{2a}{n} \quad \text{para todo } n = 1, 2, 3, \ldots. \tag{37.11}$$

Luego, las únicas soluciones posibles de la ecuación de Schrödinger para el problema del pozo de potencial infinito son

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ D\,\text{sen}\left[\dfrac{n\pi x}{a}\right] \text{ con } n = 1, 2, 3, \ldots & \text{para } 0 \le x \le a \\ 0 & \text{para } x > a. \end{cases}$$

Casi terminamos, pero aún tenemos que determinar la amplitud D de la función de onda. A fin de obtenerla usamos la condición de normalización (ecuación 37.2):

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{0} |\psi(x)|^2\, dx + \int_{0}^{a} |\psi(x)|^2\, dx + \int_{a}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx \\ &= 0 + \int_{0}^{a} \left| D\,\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right|^2 dx + 0 \\ &= |D|^2 \int_{0}^{a} \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\ &= |D|^2 \frac{a}{2}. \end{aligned}$$

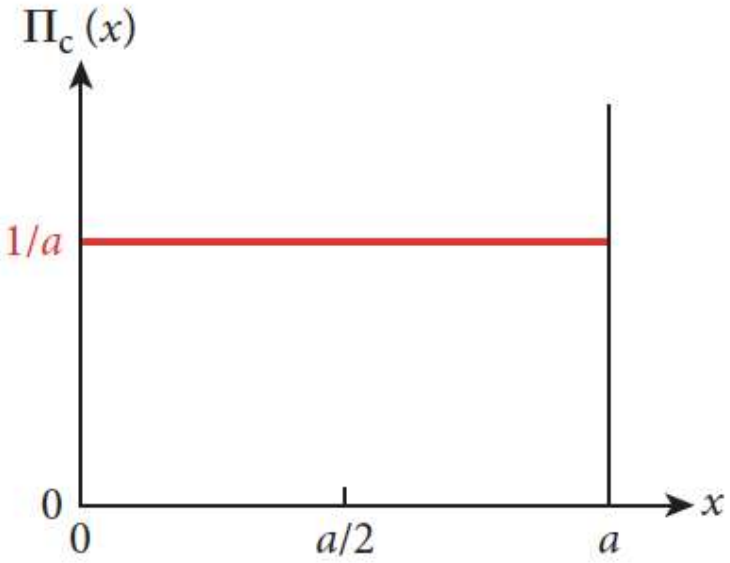


FIGURA 37.6 Distribución de probabilidad clásica de encontrar una partícula en cualquier posición particular atrapada en un pozo de potencial infinito.

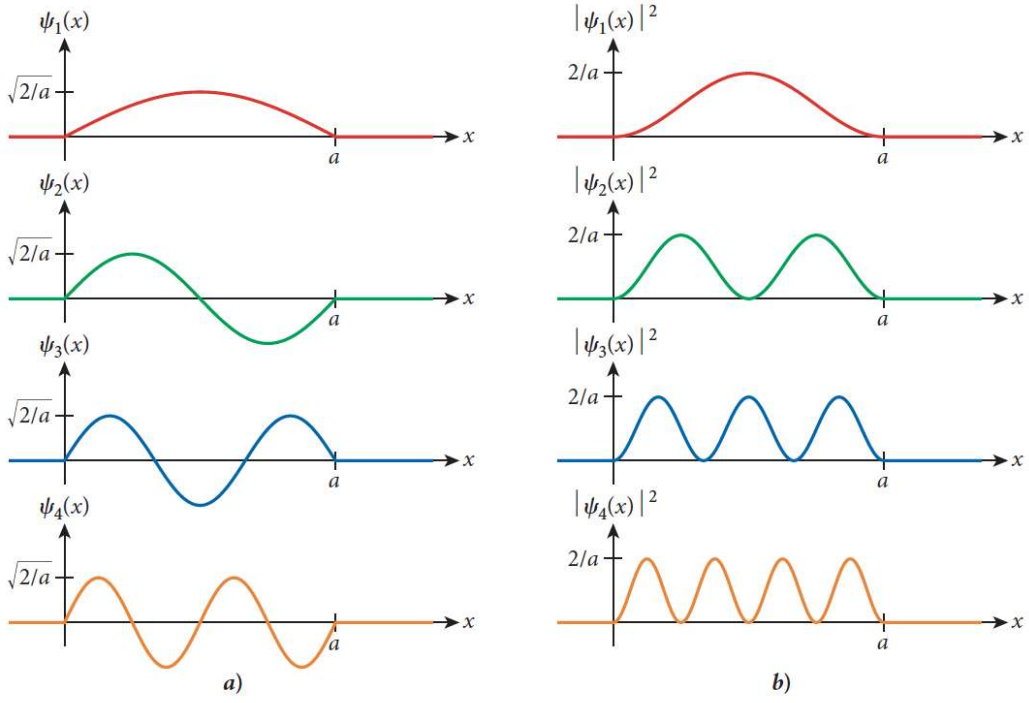


FIGURA 37.5 *a*) Funciones de onda correspondientes a los cuatro números cuánticos más bajos en un pozo de potencial infinito; *b*) probabilidad de encontrar la partícula con esta función de onda en cualquier posición particular en el pozo.

La probabilidad de encontrar una partícula en un punto dado en el espacio es proporcional a la fracción dt del tiempo total que la partícula pasa en las inmediaciones dx del punto x. En cambio, este intervalo de tiempo dt es inversamente proporcional a la velocidad $v(x)$ que tiene en este punto, $dt = dx/v(x)$. De este modo, la probabilidad clásica de encontrar una partícula en el intervalo entre x y $x + dx$ es

$$\Pi_c(x)dx \propto \frac{1}{v(x)}. \tag{37.13}$$

Si v es independiente de la posición, entonces la probabilidad clásica de encontrar una partícula debe ser una constante como una función de la posición. La distribución de probabilidad resultante se muestra en la figura 37.6.

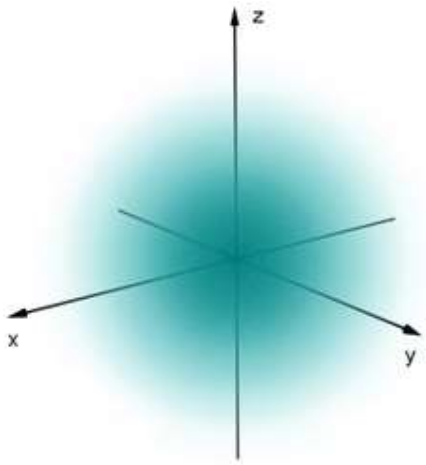
Si se compara este resultado con la distribución de probabilidad de la mecánica cuántica en la figura 37.5*b*), se notan claras diferencias. La distribución de probabilidad de la mecánica cuántica oscila entre 0 y un valor máximo de $2/a$, mientras que el valor clásico representa el promedio de esta oscilación, $1/a$. La relación entre la distribución de probabilidad clásica y la de la mecánica cuántica se analiza con mayor detalle más adelante, en este capítulo.

Debate 31. Teoría del electrón. Problemas de ecuación de Schrodinger

Teoría del electrón; Mecánica cuántica

Tras su disertación ocurrida en 1924 de Recherches sur la Theorie des cuánta («Investigación sobre la teoría cuántica»), el físico francés Louis de Broglie propuso la hipótesis de que toda la materia posee una onda similar a la de la contenida en la luz; es decir, en unas condiciones apropiadas, los electrones y demás materia

mostrarían propiedades bien de partículas o de ondas. Las propiedades corpusculares de una partícula se hacen evidentes cuando se demuestra que tiene una posición localizada en el espacio a lo largo de su trayectoria en cualquier momento. Se observan en la naturaleza ondas de luz, por ejemplo, cuando un haz de esta pasa a través de rendijas paralelas y crea patrones de interferencia. En 1927, el efecto de interferencia fue demostrado con un haz de electrones por el físico inglés George Paget Thomson con un film delgado de metal, y por los físicos americanos Clinton Davisson y Lester Germer usando un cristal de níquel.



Orbital s ($\ell = 0$, $m_\ell = 0$)

En mecánica cuántica, el comportamiento de un electrón en un átomo se describe por un orbital, que es una distribución de probabilidad más que una órbita. En la figura, el sombreado indica la probabilidad relativa de «encontrar» el electrón en este punto cuando se tiene la energía correspondiente a los números cuánticos dados.

El éxito de la predicción de Broglie llevó a la publicación en 1926 de la ecuación de Schrödinger por Erwin Schrödinger, que describe cómo se propagan las ondas de electrones. En vez de dar una solución que determina la localización de un electrón a lo largo del tiempo, esta ecuación de onda se puede utilizar para predecir la probabilidad de encontrar un electrón cerca de una posición. Este enfoque recibió posteriormente el nombre de «mecánica cuántica»; se trataba de una aproximación extremadamente precisa de los estados de energía de un electrón en un átomo de hidrógeno. Cuando se consideraron el espín y la interacción entre varios electrones, la mecánica cuántica permitió predecir con éxito la configuración de electrones de átomos con números atómicos más altos que el del hidrógeno.

En 1928, trabajando sobre la obra de Wolfgang Pauli, el británico-suizo Paul Dirac concibió un modelo del electrón, la ecuación de Dirac, consistente con la teoría de la relatividad. Dirac aplicó consideraciones relativísticas y simétricas a la formulación hamiltoniana de la mecánica cuántica del campo electromagnético. Para poder resolver algunos problemas de su ecuación relativista, en 1930, Dirac desarrolló un

modelo del vacío como un «mar» infinito de partículas con energía negativa, el cual fue llamado «mar de Dirac». Todo ello hizo que Dirac fuera capaz de predecir la existencia del positrón, el homólogo en la antimateria del electrón. Esta partícula fue descubierta en 1932 por Carl David Anderson, quien propuso que los electrones estándar se llamaran «negatrones» y que el término «electrón» se usara como un término genérico para describir las variantes cargadas tanto positiva como negativamente.

En 1947, Willis Eugene Lamb encontró, mientras trabajaba en colaboración con el estudiante de postgrado Robert Rutherford, que ciertos estados cuánticos del átomo de hidrógeno que deberían tener la misma energía se encontraban desplazados los unos respecto de los otros; esta diferencia se denomina desplazamiento de Lamb. Casi al mismo tiempo, Polykarp Kusch, que trabajaba con Henry Michael Foley, descubrió que el momento magnético del electrón es ligeramente mayor que el que predice Dirac con su teoría. Esta pequeña diferencia se llamó a posteriori momento dipolar magnético anómalo del electrón. La diferencia fue explicada más tarde por la teoría de la electrodinámica cuántica desarrollada por Sin-Itiro Tomonaga, Julian Schwinger y Richard Feynman a finales de la década de 1940.

Aceleradores de partículas

Con el desarrollo del acelerador de partículas durante la primera mitad del siglo XX, los físicos empezaron a entrar más a fondo en las propiedades de las partículas subatómicas. El primer intento con éxito de acelerar electrones utilizando la inducción electromagnética fue llevado a cabo en 1942 por Donald Kerst. Su betatrón inicial alcanzaba energías de 2,3 MeV, mientras que los betatrones posteriores podían llegar hasta 300 MeV. En 1947 se descubrió la radiación de sincrotrón gracias a un sincrotrón de electrones de 70 MeV de General Electric; esta radiación era causada por la aceleración de los electrones a través de un campo magnético moviéndose cerca de la velocidad de la luz.

Con una energía del haz de 1,5 GeV, el primer colisionador de partículas de alta energía fue el Adone, que comenzó a operar en 1968. Este aparato aceleraba los electrones y los positrones en direcciones opuestas de tal manera que doblaba la energía de su colisión con respecto al choque de un electrón con un objetivo estático. El Large Electron-Positron collider (LEP) del CERN, que estuvo activo de 1989 a 2000, consiguió energías de colisión de 209 GeV y llevó a cabo importantes descubrimientos para el modelo estándar de física de partículas.

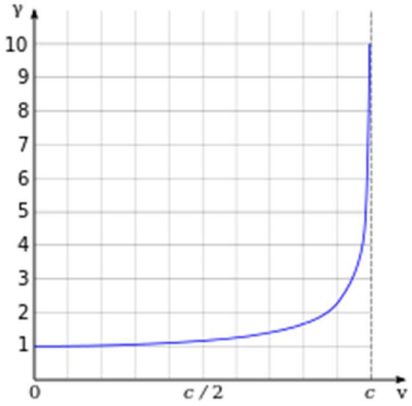
Confinamiento de electrones individuales

Actualmente se pueden confinar electrones individuales en transistores CMOS ultrapequeños (L= 20 nm, W= 20 nm) que operan a temperaturas criogénicas (del rango de 4 K a 15 K).68 La función de onda del electrón se extiende en una retícula

semiconductora e interacciona de manera despreciable con la banda de valencia de los electrones, de tal manera que se puede tratar dentro del formalismo de partícula simplemente reemplazando su masa con el tensor de masa efectiva.

Movimiento y energía

Según la teoría de la relatividad especial de Einstein, cuando la velocidad de un electrón se aproxima a la velocidad de la luz, desde el punto de vista de un observador, su masa relativista incrementa, lo que hace que sea cada vez más difícil acelerarlo dentro del marco de referencia del observador. La velocidad del electrón se puede aproximar, pero nunca llegar a la velocidad de la luz en el vacío, c. Sin embargo, cuando los electrones relativistas —es decir, electrones que se mueven a una velocidad cercana a c— insertados en un medio dieléctrico como el agua —en el que la velocidad local de la luz es mucho menor que c— viajan temporalmente más rápido que la luz en este medio. Mediante su interacción con el medio generan una luz tenue que se llama radiación de Cherenkov.

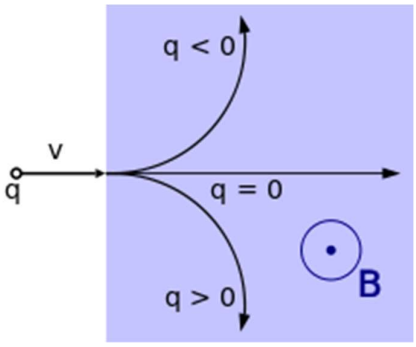


Factor de Lorentz como una función de la velocidad. Se inicia en el valor 1 y se va hasta el infinito tantas v como enfoques c.

Los efectos de la relatividad especial se basan en una cantidad conocida como el factor de Lorentz, que se define como , $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ donde v es la velocidad de la partícula. La energía cinética (Ec) de un electrón que se mueve a velocidad v es:
$K_e = (\gamma - 1)m_e c^2,$
donde me es la masa del electrón. Por ejemplo, el acelerador lineal de Stanford puede acelerar un electrón hasta aproximadamente unos 51 GeV. Como un electrón se comporta como una onda, donde determinada velocidad poseerá una longitud de onda de De Broglie que viene dada por λe=h/p, donde h es la constante de Planck y p es la cantidad de movimiento. Para el electrón de 51 GeV mencionado anteriormente, la longitud de onda obtenida es de aproximadamente 2,4 × 10^{-17} m, lo suficientemente pequeña para poder explorar estructuras de tamaño muy inferior a la del núcleo atómico.

Interacción

Un electrón genera un campo eléctrico que ejerce una fuerza de atracción sobre una partícula de carga positiva (tal como el protón) y una carga de repulsión sobre una partícula de carga negativa. La magnitud de esta fuerza se determina mediante la ley de Coulomb del inverso del cuadrado. Cuando un electrón está en movimiento genera un campo magnético. La ley de Ampère-Maxwell relaciona el campo magnético con el movimiento masivo de los electrones (la corriente eléctrica) respecto de un observador. Esta propiedad de inducción, por ejemplo, es la que da el campo magnético necesario para hacer funcionar un motor eléctrico. El campo electromagnético de una partícula cargada de movimiento arbitrario se expresa mediante los potenciales de Liénard-Wiechert, los cuales son válidos incluso cuando la velocidad de la partícula es cercana a la de la luz (relatividad).

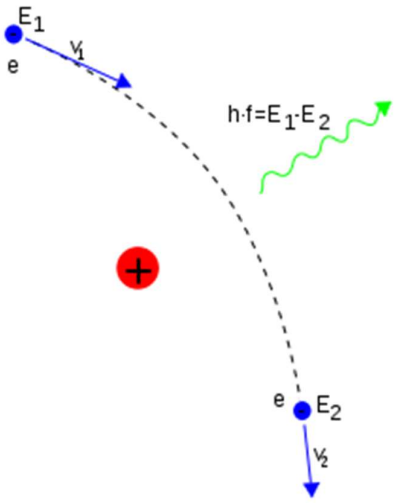


Una partícula con carga q (a la izquierda) se mueve con velocidad v a través de un campo magnético B que se orienta hacia el espectador. Para un electrón, q es negativa por lo que sigue una trayectoria curvada hacia la parte superior.

Cuando un electrón se mueve a través de un campo magnético está sujeto a la fuerza de Lorentz, la cual ejerce una influencia en una dirección perpendicular al plano definido por el campo magnético y la velocidad del electrón. La fuerza centrípeta hace que el electrón siga una trayectoria helicoidal a través del campo con un radio que se llama radio de Larmor. La aceleración de este movimiento curvado induce al electrón a radiar energía en forma de radiación sincrotrón. La emisión de energía, a su vez, causa un retroceso del electrón conocido como fuerza de Abraham-Lorentz, que crea una fricción que ralentiza el electrón. Esta fuerza es causada por una reacción inversa del mismo campo del electrón sobre sí mismo.

En electrodinámica cuántica, la interacción electromagnética entre partículas es mediada por fotones. Un electrón aislado que no está sufriendo ninguna aceleración no es capaz de emitir o absorber un fotón real, si lo hiciera violaría la conservación de la energía y la cantidad de movimiento. En lugar de ello, los fotones virtuales pueden transferir cantidad de movimiento entre dos partículas cargadas.98 Este

intercambio de fotones virtuales genera, por ejemplo, la fuerza de Coulomb. La emisión de energía puede tener lugar cuando un electrón en movimiento es desviado por una partícula cargada (por ejemplo, un protón). La aceleración del electrón tiene como resultado la emisión de radiación Bremsstrahlung.



Aquí, un electrón es desviado por el campo eléctrico de un núcleo atómico produce prenorradiación. El cambio de energía E2 − E1 determina la frecuencia f del fotón emitido.

Una colisión inelástica entre un fotón (luz) y un electrón solitario (libre) se llama difusión Compton. Esta colisión resulta en una transferencia de cantidad de movimiento y energía entre las partículas que modifica la longitud de onda del fotón en un fenómeno denominado desplazamiento de Compton. La máxima magnitud de este desplazamiento de longitud de onda es h/mec, lo que se conoce como longitud de onda de Compton,100 que para el electrón toma un valor de $2{,}43 \times 10^{-12}$ m. Cuando la longitud de onda de la luz es larga (por ejemplo, la longitud de onda de la luz visible es de 0,4-0,7 micras) el desplazamiento de la longitud de onda se convierte despreciable. Este tipo de interacción entre la luz y electrones libres se llama difusión Thomson.

La magnitud relativa de la interacción electromagnética entre dos partículas cargadas, tales como un electrón y un protón, viene dada por la constante de estructura fina. Esta constante es una cantidad adimensional y representa la proporción entre dos energías: la energía electrostática de atracción (o repulsión) en una separación de una longitud de onda de Compton, y el resto de energía de la

carga. Tiene un valor de $\alpha \approx 7{,}297353 \times 10^{-3}$, que equivale aproximadamente a 1/137.

Cuando colisionan electrones y positrones se aniquilan unos a otros y dan lugar a dos o más fotones de rayos gamma. Si el electrón y el positrón tienen una cantidad de movimiento despreciable se puede formar un positronio antes de que la aniquilación resulte en dos o tres fotones de rayos gamma de un total de 1.022 MeV. Por otro lado, los fotones de alta energía pueden transformarse en un electrón y un positrón mediante el proceso conocido como creación de pares, pero solo con la presencia cercana de una partícula cargada, como un núcleo.

Según la teoría de la interacción electrodébil, la componente izquierdista de la función de onda del electrón forma un doblete de isospín débil con el neutrino electrónico. Esto significa que, durante las interacciones débiles, los neutrinos electrónicos se comportan como si fueran electrones. Cualquiera de los miembros de este doblete pueden sufrir una interacción de corriente cargado emitiendo o absorbiendo un W y ser absorbidos por el otro miembro. La carga se conserva durante esta reacción porque el bosón W también lleva una carga, por lo que se cancela cualquier cambio neto durante la transmutación. Las interacciones de corriente cargadas son responsables del fenómeno de la desintegración beta en un átomo radiactivo. Finalmente, tanto el electrón como el neutrino electrónico pueden sufrir una interacción de corriente neutral mediante un intercambio de Z0. Este tipo de interacciones son responsables de la difusión elástica neutrino-electrón.

Propiedades fundamentales

La masa invariante de un electrón es aproximadamente de 9.109×10^{-31} kg o,71 equivalentemente, de 5.489×10^{-4} uma. Según el principio de equivalencia masa-energía de Einstein, esta masa corresponde a una energía en reposo de 0,511 MeV. La proporción entre la masa de un protón y la de un electrón es aproximadamente de 1836 a 1.1372 Medidas astronómicas demuestran que la proporción entre las masas del protón y el electrón han mantenido el mismo valor durante, al menos, la mitad de la edad del universo, tal como predice el modelo estándar.

El electrón tiene una carga eléctrica de $-1{,}602 \times 10^{-19}$ coulomb; esta carga se utiliza como unidad estándar de carga de las partículas subatómicas. Dentro de los límites de la precisión experimental, la carga del electrón es idéntica a la del protón pero con el signo opuesto. Como el símbolo 'e' se utiliza para la carga elemental, el electrón se suele simbolizar por e- (el símbolo - indica la carga negativa). El positrón se simboliza por e+ porque tiene las mismas propiedades que el electrón pero carga positiva.

El espín (momento angular intrínseco) del electrón es de 1/2. Esta propiedad se suele indicar, refiriéndose al electrón, como una partícula espín -1/2. Para este tipo de partículas, la magnitud de espín es $\sqrt{3}/2\ \hbar$, y el resultado de la medida de la proyección del espín sobre cualquier eje solo puede ser $\pm\hbar/2$. De forma adicional al espín, el electrón tiene un momento magnético a lo largo de su eje que es aproximadamente un magnetón de Bohr, el cual es una constante física que equivale a 9,27400915 (23) × 10^{-24} joules por tesla. La orientación del espín respecto al momento del electrón define la propiedad de las partículas elementales conocida como helicidad.

El electrón no tiene ninguna subestructura conocida. Es por ello que se define como una partícula puntual con carga puntual y sin extensión espacial. Si se observa un solo electrón mediante una trampa de Penning (llamada así por F. M. Penning (1894–1953) y Hans Georg Dehmelt (1922–2017), quienes construyeron la primera) se puede ver que el límite superior del radio de la partícula es de 10-22 metros. Existe una constante física llamada radio clásico del electrón, de un valor mucho mayor (2,8179 × 10^{-15} m); sin embargo, la terminología proviene de un cálculo simplificado que ignora los efectos de la mecánica cuántica. En realidad, el llamado radio clásico del electrón tiene poco que ver con la estructura fundamental verdadera de esta partícula.

Hay partículas elementales que se desintegran espontáneamente en partículas menos masivas. Un ejemplo es el muon, el cual se desintegra en un electrón, un neutrino y un antineutrino, y que tiene una vida media de 2,2 × 10^{-6} segundos. Sin embargo, se cree que el electrón es estable en terrenos teóricos: el electrón es la partícula de menos masa con una carga eléctrica diferente de cero, por lo que su desintegración violaría la conservación de carga. El límite inferior experimental de la vida media de un electrón es de 4,6 × 10^{26} años, con un intervalo de confianza del 90 %.

Cuestionario:

1.- Si la mecánica cuántica sustituye el lenguaje de la mecánica newtoniana, ¿por qué no hay que usar funciones de onda para describir el movimiento de cuerpos macroscópicos, como pelotas de béisbol y automóviles?

2.- Un estudiante hace notar que la relación entre la óptica geométrica y el esquema ondulatorio más general es análoga a la relación entre la mecánica newtoniana, con trayectorias de partícula bien definidas, y la mecánica cuántica. Comente esta apreciación.
3.- Como indica la ecuación

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$ (función de onda dependiente del tiempo para un estado de energía definida)

La función de onda dependiente del tiempo para un estado estacionario es un número complejo que tiene una parte real y otra parte imaginaria. ¿Cómo es posible que esta función tenga un significado físico, si tiene una parte imaginaria?

4.- ¿Por qué debe normalizarse la función de onda de una partícula?

5.- Si una partícula se encuentra en un estado estacionario, ¿quiere decir eso que no se mueve? Si una partícula se mueve en el espacio S vacío, con un momento lineal constante p y, en consecuencia, con energía constante E = p2□/2m, ¿se encuentra en un estado estacionario? Explique sus respuestas.

6.- Para una partícula en una caja se elige k = nπ con n = 1, 2, 3, ... con la finalidad de ajustarse a la condición de frontera de que c = 0 cuando x = L. Sin embargo, n = 0, -1, -2, -3, ... también satisfacen esa condición de frontera. ¿Por qué no elegimos también esos valores de n?

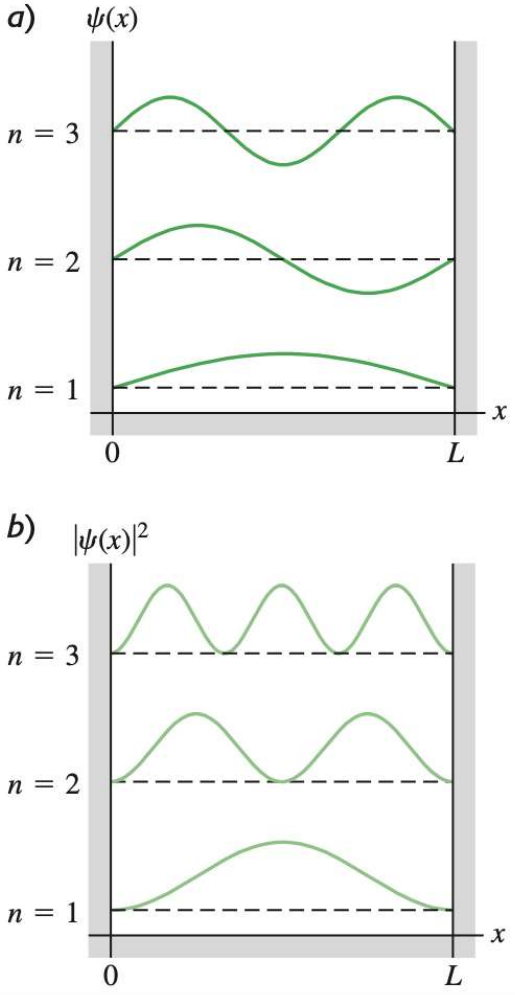
7.- Si Ψ se normaliza, ¿cuál es el significado físico del área bajo la curva de $|\psi|^2$ contra x, entre x1 y x2? ¿Cuál es el área total bajo la curva de$|\psi|^2$ cuando se incluyen todas las x? Explique por qué.

8.- Para una partícula en una caja, ¿cómo se vería la función de distribución de probabilidad $|\psi|^2$ si la partícula se comportara como una partícula clásica (newtoniana)? ¿Las distribuciones de probabilidad reales tienden a esta forma clásica cuando n es muy grande? Explique por qué.

9.- Si representamos una onda estacionaria como una superposición de dos ondas que viajan en direcciones opuestas. ¿Se podría pensar también que las funciones de onda de una partícula en una caja son una combinación de dos ondas viajeras? ¿Por qué? ¿Qué interpretación física tiene esta representación? Explique su respuesta.

10.- Una partícula en una caja está en el nivel fundamental. ¿Cuál es la probabilidad de que la partícula se encuentre en la mitad derecha de la caja? (Véase la figura, pero no evalúe una integral). ¿La respuesta es la misma si la partícula está en un nivel excitado? Explique por qué.

40.12 Gráficas de *a*) $\psi(x)$ y *b*) $|\psi(x)|^2$ para las primeras tres funciones de onda ($n = 1$, 2, 3) de una partícula en una caja. Las líneas punteadas horizontales representan $\psi(x) = 0$ y $|\psi(x)|^2 = 0$ para cada uno de los tres niveles. El valor de $|\psi(x)|^2$ en cada punto es la probabilidad de encontrar la partícula en un intervalo pequeño dx centrado en el punto. Como en la figura 40.11*b*, las tres gráficas en cada parte se desplazaron verticalmente por claridad.



11.- Las funciones de onda para una partícula en una caja (véase la figura) son cero en esos puntos. ¿Eso quiere decir que la partícula no puede moverse y pasar por uno de esos puntos? Explique.

12.- Para una partícula confinada en un pozo cuadrado infinito, ¿es correcto decir que cada estado de energía definida también es un esta do de longitud de onda

definida? ¿También es un estado de momento lineal definido? Explique. (Sugerencia: Recuerde que el momento lineal es un vector).

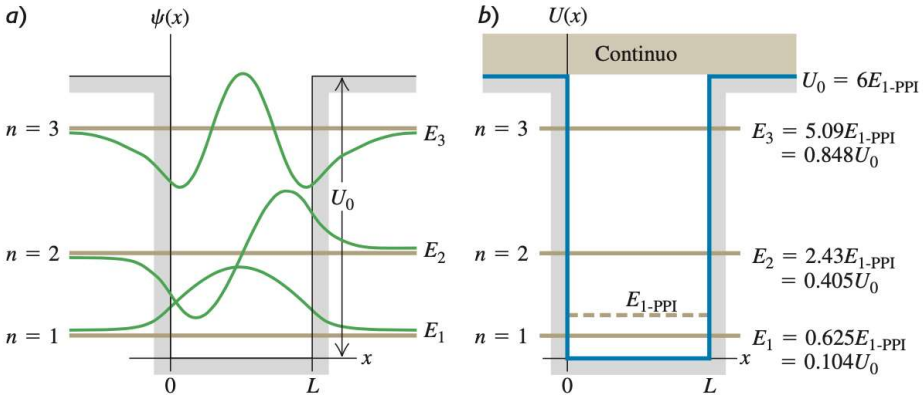
13.- Para una partícula en un pozo de potencial finito, ¿es correcto decir que cada estado confinado de energía definida también es un estado de longitud de onda definida? ¿Es un estado de momento lineal definido? Explique por qué.

14.- En la figura 40.12b, la función de probabilidad es cero en los puntos x = 0 y x = L, las “paredes” de la caja. ¿Quiere decir eso que la partícula nunca choca contra las paredes? Explique por qué.

15.- En forma cualitativa, ¿cómo espera que la probabilidad de que una partícula que hace tunelamiento a través de una barrera de potencial dependa de la altura de la barrera? Explique.

16.- Compare las funciones de onda para los tres primeros niveles de energía de una partícula en una caja de ancho L (véase la figura 40.12a) con las funciones de onda correspondientes a un pozo de potencial finito del mismo ancho (véase la figura 40.15a). ¿Cómo se compara la longitud de onda en el intervalo 0menor o igual quexmenor o igual queL para el nivel n=1dela partícula en una caja, con la longitud de onda correspondiente del nivel n = 1 en el pozo de potencial finito? Use el resultado para explicar por qué El es menor que E1-PPI en el caso que muestra la figura 40.15b.

40.15 *a*) Funciones de onda de los tres estados ligados para una partícula en un potencial finito con una profundidad del pozo de U_0, para el caso $U_0 = 6E_{1\text{-PPI}}$. (Aquí, $E_{1\text{-PPI}}$ es la energía fundamental para un pozo infinito del mismo ancho). La línea café horizontal para cada función de onda corresponde a $\psi = 0$; la posición vertical de estas líneas indica la energía de cada estado confinado (compare con la figura 40.11). *b*) Diagrama de niveles de energía para este sistema. Las energías se expresan tanto en múltiplos de $E_{1\text{-PPI}}$ como en fracciones de U_0. Todas las energías mayores que U_0 son posibles; los estados con $E > U_0$ forman un continuo.



La figura 40.15 muestra el caso específico donde $U_0 = 6E_{1\text{-PPI}}$; en este caso, hay tres estados ligados. En la figura, se expresan tanto los niveles de energía como las fracciones de la profundidad del pozo U_0, y los múltiplos de $E_{1\text{-PPI}}$. Observe que si el pozo fuera infinitamente profundo, los tres niveles inferiores, de acuerdo con la ecuación (40.31), serían $E_{1\text{-PPI}}$, $4E_{1\text{-PPI}}$ y $9E_{1\text{-PPI}}$. En la figura 40.15 también se muestran las funciones de onda de los tres estados ligados.

17.- En la sección 40.3 se indicó que un pozo de potencial finito siempre tiene cuando menos un nivel confinado, sin importar lo superficial que sea. ¿Quiere decir eso que cuando $U_0 \to 0, E_1 \to 0$? ¿Viola eso el principio de incertidumbre de Heisenberg? Explique por qué.

18.- La figura 40.15a indica que cuanto mayor sea la energía de un estado confinado en un pozo de potencial finito, la función de onda se extenderá más hacia fuera del pozo (en los intervalos x < 0 y x > L). Explique por qué sucede esto.

19.- En la mecánica clásica (newtoniana), la energía total E de una partícula nunca es menor que la energía potencial U, ya que la energía cinética K no puede ser negativa. Sin embargo, en el tunelamiento a través de una barrera (véase la sección 40.4), una partícula atraviesa por regiones donde E es menor que U. ¿Es eso una contradicción? Explique por qué.

20.- Compare los niveles de energía permitidos para el átomo de hidrógeno, la partícula en una caja y el oscilador armónico. ¿Cuáles son los valores del número cuántico n para el nivel fundamental y el segundo nivel excitado de cada sistema?

Debate 32. Potencial Escalón. Pozos de potencial finito e infinito

REVISAR LOS SIGUIENTES ENLACES

- Postulados de la mecánica cuántica https://www.youtube.com/watch?v=GbJOKbERLwg&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=25. 18:57

- Pozo de potencial finito https://www.youtube.com/watch?v=ZZULPeSmYEQ&list=PL4i6Jlnz3GWWZrfunORQU1PkQ7wlBzaaD 10:50

- Pozo de potencial infinito https://www.youtube.com/watch?v=v1VmLquAR6E 23:38

- Partícula en una caja https://www.youtube.com/watch?v=MzgiE4mjl1o&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=26 23:16

- Problema de la partícula en una caja https://www.youtube.com/watch?v=qg2GKg2w9zQ&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=27 17:29

- Potencial escalón https://www.youtube.com/watch?v=0eD_ODwhEss 35:26

Introducción

El pozo de potencial infinito es un tópico en la mecánica cuántica, uno de los primeros problemas que se enseñan a los estudiantes de Física Cuántica. Enunciado de forma más intuitiva, este problema no es otra cosa que una partícula dentro de una caja para la que no actúa ninguna otra fuerza (como la gravedad) mas allá de las que ejercerán la paredes de la caja cuando la partícula se acerque a ellas, haciendo imposible que se salga de la caja. El hecho de no haber considerado la gravedad o un modelo más realista de la fuerza (o, equivalentemente, del potencial del que deriva la fuerza) ejercida por las paredes tiene la única función de

hacer el problema más sencillo de resolver; sin embargo, otro más realista llegará a conclusiones muy similares a las estudiada en este.

La solución de la ecuación de Schrödinger (mediante la cual "habla" la teoría de la mecánica cuántica) a este problema nos mostrará, además de otras cosas más sutiles, que la partícula dentro de una caja no puede tener cualquier energía, sino que dichos valores posibles se encuentran "cuantizados". Es decir, que el valor de la energía total que tiene la partícula no puede ser cualquiera, sino que siempre (que un observador lo mida) podrá únicamente tener determinados valores singulares que dependerán de las dimensiones de la caja, sin importar nada más.

Planteamiento de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Pozo de potencial infinito (o caja) unidimensional de anchura L con la primera pared en x=0.

Un pozo de potencial infinito, en general, tiene la pared izquierda en un punto x=a y la derecha en x=b, (a<b). Esta información es equivalente a decir que la pared izquierda se encuentra en el punto a y que el pozo tiene anchura L. La relación entre ambas, claramente, es L=b-a. Normalmente, cuando se plantea este problema se deja como variable únicamente la anchura del potencial, pero no su posición en el eje de coordenadas, a menudo impuesta por el enunciado del problema. En tal caso, las dos opciones por excelencia son que el pozo se encuentra centrado en el origen, con la pared izquierda en x=-L/2 y la derecha en x=L/2, o bien que tiene una pared en x=0 y otra en x=L.

Dichas elecciones, como veremos, tienen repercusión sobre las funciones matemáticas necesarias para describir la función de onda solución, aunque las energías permitidas, como cabe esperar, solo depende de cuál es la anchura del pozo, y no del hecho que artificialmente y como instrumento matemático "coloquemos" un eje de coordenadas paralelo al pozo de potencial y de que a alguno de sus puntos le llamemos x=0.

Resolvamos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}),$$

que en el caso de una dimensión es simplemente

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x).$$

O lo que es lo mismo

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)\Psi(x) = 0.$$

Fuera del pozo, la función de onda debe ser igual a cero ya que, por hipótesis, al decir que la altura del pozo es infinita, queremos indicar que es completamente seguro que las partículas no pueden atravesar dichas barreras de potencial. Dado que la función de onda es una función continua, por muy poco que nos alejemos de a por la izquierda o de b por la derecha el valor de la función será igual a cero, por lo que también debe serlo en los extremos a y b para que se trate de una función continua. Sin embargo, a muy poco que nos introducimos dentro del pozo, la función de onda tomará otros valores distintos de cero.

Resolvamos la ecuación de Schrödinger dentro del pozo, donde U(x)=0:

$$\Psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) = 0.$$

Dado que hemos decidido tomar a y b genéricos, lo más sencillo es usar una solución general de esta ecuación diferencial en términos de exponenciales complejas.

$$\Psi(x) = Ae^{i\omega x} + Be^{-i\omega x},$$

donde hemos definido

$$\omega^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Obtención de las energías accesibles al sistema

Impongamos la primera condición, $\Psi(a) = 0$

$0 = \Psi(a) = Ae^{i\omega a} + Be^{-i\omega a} \Rightarrow B = -Ae^{2i\omega a}$, y sustituyamos en nuestra solución general

$$\begin{aligned}\Psi(x) =& Ae^{i\omega x} - Ae^{2i\omega a}e^{-i\omega x} \\ =& Ae^{i\omega x}\left[1 - e^{2i\omega a}e^{-2i\omega x}\right] \\ =& Ae^{i\omega x}\left[1 - e^{2i\omega(a-x)}\right].\end{aligned}$$

$\Psi(b) = 0$

$$0 = \Psi(b) = Ae^{i\omega b}\left[1 - e^{2i\omega(a-b)}\right] \Rightarrow \begin{cases} A = 0 & \Rightarrow \Psi(x) = 0, \quad \forall x \\ \text{o} & \\ e^{2i\omega(a-b)} = 1 & \Rightarrow 2i\omega(a-b) = 0 + 2\pi ik, \quad k \in \mathbf{Z}. \end{cases}$$

Ya que la función exponencial no se anula nunca, vemos que para que la función de onda sea nula tiene que, o bien ser idénticamente cero también dentro del pozo, o bien, que el término entre corchetes sea igual a cero. Como la función exponencial compleja es periódica con periodo $2\pi i$, hemos considerado todos los valores del plano complejo que hacen que la exponencial valga 1.

Centrémonos en este último caso que es el único no trivial. Despejemos w e la ecuación anterior

$$\omega = \frac{\pi k}{b-a} = \frac{\pi k}{L}, \quad k \in \mathbf{Z}.$$

Debemos coincidir por tanto que, para tener una solución a la ecuación de Schödinger con las condiciones de contorno impuestas por nuestro potencial, los valores de w necesariamente deben estar cuantizados. Es decir, que solo puede tomar valores discretos y equi-espaciados $\pi/(b-a)$ unidades, en vez de poder tomar cualquier valor en un intervalo determinado, como es el caso de la coordenada x, que puede tomar cualquier arbitrario entre a y b. Como consecuencia de esto, las energías, autovalores del operador Hamiltoniano, también están cuantizadas

Representación de las energías accesibles para la partícula en el pozo de potencial infinito. Solo ciertos valores dibujados con líneas horizontales están permitidos. Como se observa, la diferencia entre energías posibles es cada vez mayor. Esto es una consecuencia de que E es proporcional a n^2.

$$E = \frac{\hbar^2\omega^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(b-a)^2}k^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2, \, n \in \mathbf{N}^+.$$

Nótese que para las energías solo tiene sentido considerar los números naturales en lugar de los enteros, puesto que *-k* y *k* definen la misma energía. Además **hemos descartado el valor *0*** ya que como veremos más adelante su autofunción es nula

Hamiltoniano (mecánica cuántica)

El Hamiltoniano H tiene dos significados distintos, aunque relacionados, En mecánica clásica, es una función que describe el estado de un sistema mecánico en términos de variables posición y momento, y es la base para la reformulación de la mecánica clásica conocida como mecánica hamiltoniana. En mecánica cuántica, el operador Hamiltoniano es el correspondiente al observable "energía".

Descripción cuántica de un sistema

En el formalismo de la mecánica cuántica, el estado físico del sistema puede ser caracterizado por un vector en un espacio de Hilbert complejo, separable y de dimensión infinita (lo cual permite expresar cualquier estado físico por una

secuencia contable de vectores, ponderados por sus amplitudes de probabilidades respectivas). Las magnitudes físicas observables son descritas, entonces, por operadores autoadjuntos que actúan sobre este vector (o sobre estos vectores). Los resultados posibles de una medida sobre un estado y las probabilidades con las que aparecen pueden calcularse a partir del vector que representa el estado y los vectores propios del operador autoadjunto que representa la magnitud.

Hamiltoniano cuántico

El hamiltoniano cuántico H es el observable que representa la energía total del sistema (formalmente se define como un operador autoadjunto definido sobre un dominio denso en el espacio de Hilbert del sistema). Los posibles valores de la energía de un sistema físico vienen dados por los valores propios del operador hamiltoniano:

$$\hat{H}\,|\psi\rangle = E_\psi\,|\psi\rangle$$

donde $\hat{H}$ es el operador hamiltoniano, $|\psi\rangle$es un estado propio de $\hat{H}$ y E_ψ es la energía de ese estado.

Propiedades

Por las propiedades de los operadores autoadjuntos:

1. Los vectores propios de $\hat{H}$, que satisfacen (1), forman una base ortogonal para el espacio de Hilbert.
2. El espectro de niveles de energía permitidos para el sistema viene dado por el conjunto de valores propios de E_ψ que verifican la ecuación que hay sobre estas líneas.
3. La energía del sistema siempre toma valores reales, razón por la cual la mecánica cuántica impone que para que $\hat{H}$ describa al sistema debe ser un operador hermitico.

Dependiendo del sistema físico, el espectro de energías puede ser discreto o continuo. Se da el caso de que algunos sistemas presentan un espectro continuo en un intervalo de energías, y discreto en otro. Un ejemplo es el pozo finito de energía potencial, que admite estados ligados con energías discretas y negativas, y estados libres con energías continuas y positivas, eso sucede por ejemplo en el átomo hidrogenoide.

Dependiendo del sistema físico, el operador hamiltoniano puede no estar definido sobre todo el espacio. Si no existe límite para el valor máximo de la energía de un sistema entonces el operador hamiltoniano será un operador no-acotado y en general no estará definido en todo el espacio de Hilbert de todo el sistema sino sólo en un dominio denso de él.

Evolución temporal

La evolución temporal de los estados cuánticos puede obtenerse a partir del Hamiltoniano a través de la ecuación de Schrödinger. Si $|\Psi(t)\rangle$ es el estado del sistema a tiempo t, tenemos:

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

donde $\hbar$ es la constante reducida de Planck. Dado el estado a un tiempo inicial (t = 0), podemos integrar para obtener el estado en cualquier tiempo subsiguiente. Si H además de operador autoadjunto no depende explícitamente del tiempo podemos encontrar una familia de operadores unitarios definidos sobre el espacio de Hilbert que da una solución formal de la anterior ecuación:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)\,|\Psi(0)\rangle \qquad U(t) := \exp\left(-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar\right)$$

Donde la exponencial del operador Hamiltoniano se calcula usualmente mediante serie de potencias. Se puede demostrar que es un operador unitario, y es la forma común de operador de evolución temporal o propagador.

Carácter autoadjunto

Un requerimiento matemáticamente importante para un hamiltoniano es que este sea un operador autoadjunto, sin embargo, normalmente demostrar que un determinado operador es autoadjunto es un problema matemático no trivial. Por esa razón durante mucho tiempo se desconocía si el hamiltoniano atómico por ejemplo era realmente un operador autoadjunto, aunque la evidencia sugería que efectivamente los átomos de muchos electrones eran equiparables al átomo hidrogenoide hasta mediados de siglo XX no se dispuso de una prueba matemática rigurosa. En los años 1960 y 1970 se hizo gran cantidad de trabajo en ese sentido.

El hamiltoniano para una partícula libre dado por:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

Definido sobre $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, pero el hamiltoniano relevante en un buen número de problemas incluye un potencial siendo de la forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{x})$$

Si el potencial es una función continua y acotada entonces el hamiltoniano anterior es autoadjunto, acotado y por tanto definido sobre todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ y en este caso se dice que el potencial es una perturbación acotada de $\hat{H}_0$. Sin embargo, muchos problemas físicos importantes como los sistemas atómicos tienen potenciales no acotados inferiormente. Aunque Kato (1966) logró demostrar el siguiente resultado:

Si el potencial V(x) puede escribirse como la suma de dos funciones reales, una de las cuales es continua y acotada y la otra es una función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, entonces el operador definido por:

$$\begin{cases} D(\hat{H}) = \{\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) : \ \nabla^2\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)\} \\ \hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{x})\psi \end{cases}$$

es autoadjunto y acotado inferiormente.

El teorema anterior se aplica en particular al átomo hidrogenoide, para el cual $V(\mathbf{x})=-\kappa Ze^2/\|\mathbf{x}\|$ Pero además Kato logró extender el resultado anterior a un átomo con n-electrones en interacción con $Z\geq n$ para el cual:

$$V = V(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n) = -\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{\|\mathbf{x}_j\|} + \sum_{j<k=1}^{n} \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k\|}$$

El primer término representa la interacción de cada electrón con el núcleo atómico, y el segundo contabiliza la repulsión electroestática entre los diferentes pares de electrones. En este caso las funciones de onda $\psi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3n})$

Ejemplo Oscilador armónico

En el problema del oscilador armónico monodimensional, una partícula de masa m está sometida a un potencial cuadrático $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. En mecánica clásica $k = m\omega^2$ Se denomina constante de fuerza o constante elástica , y depende de la masa m de la partícula y de la frecuencia angular w.
El Hamiltoniano cuántico de la partícula es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

donde $\hat{x}$ es el operador de posición y $\hat{p}$ es el operador momento lineal $\left(\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}\right)$. El primer término representa la energía cinética de la partícula, mientras que el segundo representa su energía potencial.

Átomo de hidrógeno

La versión más simple del modelo atómico de Schrödinger emplea un hamiltoniano basado en el hamiltoniano de una partícula en un campo de Coulomb:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$$

Ese modelo predijo por primera vez los niveles energéticos con una gran precisión. Sin embargo, para dar cuenta de la estructura fina (137) es necesario añadir

correcciones relativistas y de espín, resultando un hamiltoniano más complicado dado por:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) - \frac{e\hbar}{2\mu}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} - \frac{p^4}{8\mu^3c^2} + \frac{\hbar^2}{4\mu^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\nabla}V\times\mathbf{p})$$

Donde:

$V(\mathbf{r}), \mathbf{A}(\mathbf{r})$ son el potencial escalar eléctrico y el potencial vectorial magnético, si el campo magnético fuera nulo este último vector sería cero.

$\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}(\mathbf{r})$ el campo magnético.

μ, σ la masa reducida y el espín del electrón.

$\hbar, c$ la constante de Planck racionalizada y la velocidad de la luz.

En concreto es necesario tener en cuenta en los cálculos:

- La interacción del espín electrónico con el campo magnético del núcleo atómico. (tercer término)
- Los efectos relativistas debido a la variación de la masa aparente con la velocidad. (cuarto término)
- El término de Darwin, que no tiene un análogo clásico. (quinto término)
- La interacción espín-órbita. (sexto término)

Término de Darwin

Hay un último término en la expansión no relativista de la ecuación de Dirac. Se conoce como el término de Darwin, que fue derivado por primera vez por Charles Galton Darwin, y está dado por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{Darwin}} &= \frac{\hbar^2}{8m_e^2c^2}\,4\pi\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\delta^3\left(\vec{r}\right)\\
\langle\mathcal{H}_{\text{Darwin}}\rangle &= \frac{\hbar^2}{8m_e^2c^2}\,4\pi\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)|\psi(0)|^2\\
\psi(0) &= 0 \text{ for } l > 0\\
\psi(0) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,2\left(\frac{Z}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \text{ for } l = 0\\
\mathcal{H}_{\text{Darwin}} &= \frac{2n}{m_ec^2}\,E_n^2
\end{aligned}$$

El término de Darwin afecta solamente a los orbitales s. Esto porque la función de onda de un electrón con l > 0 se anula en el origen, por lo que la función delta no tiene efecto. Por ejemplo, al orbital 2s le da la misma energía que el orbital 2p, subiendo la energía del orbital 2s en $9.057\times10^{-5}\text{eV}$.

El término de Darwin cambia el potencial efectivo en el núcleo. Esto puede ser interpretado como una diseminación de la interacción electrostática entre el electrón y el núcleo debido a las fluctuaciones cuánticas o zitterbewegung del electrón.

Otro mecanismo que afecta sólo al órbitas es el desplazamiento de Lamb, una pequeña corrección que surge de la electrodinámica cuántica que no debe ser confundida con el término de Darwin. El término de Darwin le da al orbital s y al orbital p la misma energía, pero el desplazamiento de Lamb hace que el orbital s tenga una mayor energía que el orbital p.

Cuestionario:

1.- ¿Que es una función de onda?

2.- ¿Que es un Eigenvalor?

3.- ¿Cómo podemos lograr obtener las autofunciones de onda?

4.- ¿Qué es un Hamiltoniano cuántico?

5.- ¿Cómo defines un Pozo de Potencial finito e Infinito?

Debate 33. Efecto Túnel. Partícula en una caja tridimensional

https://www.youtube.com/watch?v=sgH6vWiwzr0

https://www.youtube.com/watch?v=mBxTUaqAuEY

https://www.youtube.com/watch?v=1pZoQvtiO_c

Ejemplo Partícula en una caja

https://www.youtube.com/watch?v=9n1E3C5eVO0

Efecto túnel

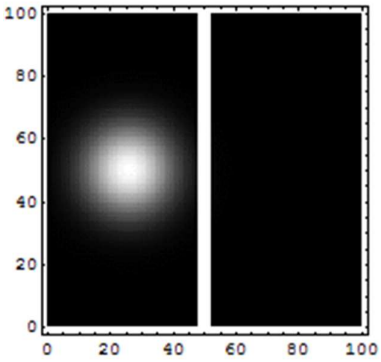


Imagen 1. Reflexión y "tunelado" de un electrón dirigido hacia una barrera de potencial. El punto resplandeciente moviéndose de derecha a izquierda es la sección reflejada del paquete de onda. Un vislumbre puede observarse a la derecha de la barrera. Esta pequeña fracción del paquete de onda atraviesa el túnel de una forma imposible para los sistemas clásicos. También es notable la interferencia de los contornos entre las ondas de emisión y de reflexión.

En mecánica cuántica, el efecto túnel es un fenómeno cuántico por el que una partícula viola los principios de la mecánica clásica penetrando una barrera de potencial o impedancia mayor que la energía cinética de la propia partícula. Una barrera, en términos cuánticos aplicados al efecto túnel, se trata de una cualidad del estado energético de la materia análogo a una "colina" o pendiente clásica, compuesta por crestas y flancos alternos, que sugiere que el camino más corto de un móvil entre dos o más flancos debe atravesar su correspondiente cresta intermedia. Si el objeto no dispone de energía mecánica suficiente como para atravesar la barrera, la mecánica clásica afirma que nunca podrá aparecer en un estado perteneciente al otro lado de la barrera.

A escala cuántica, los objetos exhiben un comportamiento ondular; en la teoría cuántica, un cuanto moviéndose en dirección a una "colina" potencialmente energética puede ser descrito por su función de onda, que representa la amplitud probable que tiene la partícula de ser encontrada en la posición allende la estructura de la curva. Si esta función describe la posición de la partícula perteneciente al flanco adyacente al que supuso su punto de partida, existe cierta probabilidad de que se haya desplazado "a través" de la estructura, en vez de superarla por la ruta convencional que atraviesa la cima energética relativa. A esto se conoce como efecto túnel.

El efecto túnel juega un papel esencial en muchos fenómenos físicos como, por ejemplo, en la fusión nuclear que ocurre en la secuencia principal de estrellas como

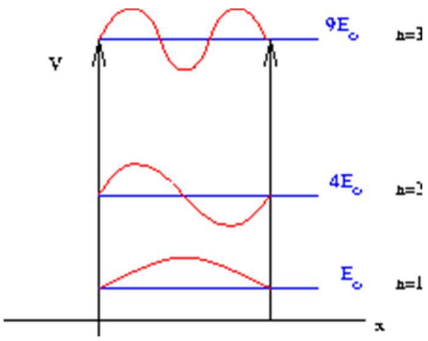
el Sol. La energía que poseen los hidrones (catión hidrógeno) en el núcleo del Sol no es suficiente para superar la barrera de potencial que produce la repulsión electromagnética entre ellos. Gracias al efecto túnel, existe una pequeña probabilidad de que algunos hidrones la sobrepasen, produciendo la fusión de los mismos y liberando energía en forma de radiación electromagnética.2Aunque la probabilidad de que se produzca este efecto túnel es muy pequeña, la inmensa cantidad de partículas que componen el Sol hace que este efecto se produzca constantemente. Esto explica por qué cuanto más masiva es una estrella (como una supergigante azul), más corta es su secuencia principal, ya que la energía cinética de los hidrones es mayor y, en consecuencia, la probabilidad del efecto túnel también.

Partícula en una caja. Cuantización de la Energía

Para comenzar vamos a estudiar el sistema de una partícula en una caja de paredes impenetrables. Para simplificar las cosas vamos a estudiar el sistema en una dimensión.

Para representar la caja podemos suponer que en las paredes existe un potencial infinito que no permite que la partícula escape y que dentro de la misma la partícula puede moverse libremente. Podemos suponer que la caja esta situada de manera que el potencial V(x) esta dado por

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & x > L \end{cases}$$



Condiciones de Frontera

La función de ondas debe ser *continua* en todos los puntos, y como la partícula no puede penetrar del otro lado de la caja

$$\psi(x) \equiv 0 \qquad \text{para } x < 0, \text{ y } \quad x > L$$

entonces

$$\psi(x) \equiv 0$$

en las paredes de la caja.

Tambien necesitamos que la primera derivada de la función de ondas sea continua en la frontera.

La ecuación de Schrödinger dentro de la caja es la ecuación para una partícula libre:

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

cuyas soluciones están dadas por

$$\psi(x) = A\sin\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$

$$\psi(x) = B\cos\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$

Podemos comprobar directamente estas soluciones por sustitución en la ecuación de Schrödinger.

La solución general es pues una superposición de ambas soluciones.

$$\psi(x) = A\sin\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x + B\cos\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$

La condición de frontera $\psi(x=0)=0$ implica inmediatamente que *B*=0, pues $\cos(0)=1$. Por otra parte $\sin(0)=0$ siempre, pero la condición

$$\psi(x=L)=0$$

implica que

$$A\sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L\right) = 0$$

Esta condición solo se satisface para ciertos valores discretos de la Energía tales que

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L = n\pi \quad (\pi, 2\pi, 3\pi, \ldots)$$

Si despejamos la energía encontramos que los valores posibles son

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

Los valores de la energía representan los posibles *niveles de energía del sistema*.
Los niveles de energía estan *cuantizados* y son discretos. Esta es una característica de los sistemas *confinados*.
El número $n = 1, 2, 3, \ldots$ es llamado *número cuántico*
La exclusión de *E*=0 es una consecuencia de la mecánica cuántica.
La incertidumbre en la posición de la partícula dentro de la caja $\Delta x = L$ implica que $\Delta p \geq \frac{\hbar}{L}$

Efecto túnel

Consideremos ahora la situación en la que un salto de potencial (una pared no rígida) se interpone ante el viaje de una partícula. El potencial correspondiente tiene la forma

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \quad yx > a \\ V_0 & 0 < x < a \end{cases}$$

Al resolver la ecuación de Schrödinger para el caso en que la partícula tenga una energía $E < V_0$ vemos que existe la posibilidad de que la partícula atraviese la pared y continue su viaje. A este efecto se le conoce como Efecto Tunel.
Como hemos visto anteriormente, las soluciones en la primera y tercera región son de tipo oscilatorio, mientras que la solución en la segunda región (donde el potencial es mayor que la energía) son de tipo exponenciales. La siguiente figura muestra una posible solución a este problema.

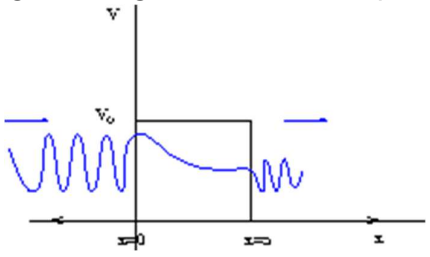


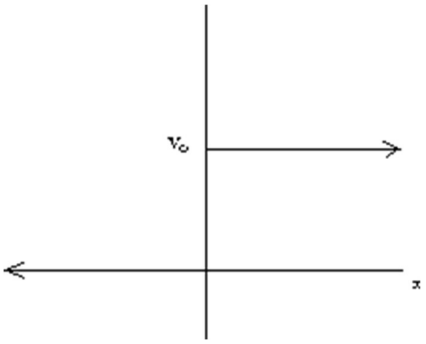
Figura 7: Efecto tunel

Barrera de Potencial

Analicemos ahora el problema de una barrera de potencial descrita por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 > 0 & x > 0 \end{cases}$$

donde V_0 es constante.



Nuevamente las soluciones son de la forma

$$\psi(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}$$

en cada región. Consideremos el caso en el que la energía es menor que el potencial de la barrera, ed decir $E < V_0$. Entonces las soluciones en la región de la derecha deben ser exponenciales decrecientes, es decir que kappa_2 es imaginaria como se vera un poco mas adelante. Las condiciones de continuidad de la función de onda y de su primera derivada son por lo tanto:

Continuidad de $\psi(x)$

$$(x = 0) \qquad \psi(x = 0) = A_1 e^{+ik_1 0} + B_1 e^{-ik_1 0} = A_2 e^{+ik_2 0} + B_2 e^{-ik_2 0}$$

es decir que

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

La condición de que en la región de la derecha sea una exponencial decreciente (suponiendo que kappa_2 es imaginaria positiva y por tanto +i kappa_2 = -|kappa_2|) impone que

$$B_2 = 0$$

Continuidad de $\psi'(x)$

$$(x = 0) \qquad \psi'(x = a) = i\kappa_1 \left(A_1 e^{+i\kappa_1 0} - B_1 e^{-i\kappa_1 0} \right) = i\kappa_2 A_2 e^{+i\kappa_2 0}$$

o sea que

$$i\kappa_1 (A_1 - B_1) = i\kappa_2 A_2$$

Tenemos por lo tanto las dos ecuaciones:

$$A_1 + B_1 = A_2$$

$$i\kappa_1 (A_1 - B_1) = i\kappa_2 A_2$$

con

$$\kappa_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{y} \quad \kappa_2 = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}.$$

Observe que kappa_2 ha resultado efectivamente imaginaria (ya que el argumento de la raiz cuadrada es positivo dado que $E < V_0$)

Tenemos tres incógnitas (A1, A2 y B1) y dos ecuaciones :

$$A_1 + B_1 = A_2$$

$$i\kappa_1 (A_1 - B_1) = i\kappa_2 A_2$$

Una de las incognitas se determina por la condición de normalización de la función de onda. Pensemos que B_1 se ha determinado ya precisamente mediante esta condicion de normalizacion.

Escribamos ahora las ecuaciones anteriores como

$$B_1 \left(\frac{A_1}{B_1} + 1 \right) = A_2 \quad \Rightarrow \quad \frac{A_1}{B_1} + 1 = \frac{A_2}{B_1}$$

$$i\kappa_1 B_1 \left(\frac{A_1}{B_1} - 1 \right) = i\kappa_2 A_2 \quad \Rightarrow \quad i\kappa_1 \left(\frac{A_1}{B_1} - 1 \right) = i\kappa_2 \frac{A_2}{B_1}$$

podemos pensar que nuestras *incógnitas* ahora son

$$\frac{A_1}{B_1}, \quad \text{y} \quad \frac{A_2}{B_1}$$

No es dificil resolver las ecuaciones anteriores para estas nuevas incógnitas:

$$\frac{A_1}{B_1} = -\frac{\kappa_1 + \kappa_2}{-\kappa_1 + \kappa_2}, \quad \frac{A_2}{B_1} = -\frac{2\kappa_1}{-\kappa_1 + \kappa_2}$$

La función de onda es por lo tanto

$$\psi(x) = B_1 \left(\frac{A_1}{B_1} e^{i\kappa_1 x} + e^{-i\kappa_1 x} \right) \quad \Rightarrow$$

$$\psi(x) = B_1 \left(\frac{\kappa_1 + i\tilde{\kappa}_2}{\kappa_1 - i\tilde{\kappa}_2} e^{i\kappa_1 x} + e^{-i\kappa_1 x} \right) \quad x < 0$$

(en la primera region), y

$$\psi(x) = B_1 \left(\frac{A_2}{B_1} \right) e^{i\kappa_2 x} \quad \Rightarrow$$

$$\psi(x) = B_1 \left(\frac{2\kappa_1}{\kappa_1 - i\tilde{\kappa}_2} \right) e^{-\tilde{\kappa}_2 x} \quad x > 0$$

En donde la variable kappa_2 con tilde es una cantidad r*eal y positiva* y esta definida como kappa_2 (tilde) = -i kappa_2.

La funcion de onda ha resultado ser una funcion oscilatoria en la parte de la derecha (ya que tenemos exponenciales con argumentos imaginarios), y exponencialmente decreciente en la parte de la derecha (ya que como hemos visto, kappa_2

con tilde es una cantidad real positiva).

Traspaso de Barrera

El punto más interesante en este ejemplo es el que concierne a la probabilidad de encontrar a la partícula en la región de la derecha. En la teoría clásica la partícula no puede penetrar la pared pero en el caso cuántico existe cierta probabilidad de que la particula traspase la barrera de potencial como se ve en la siguiente figura.

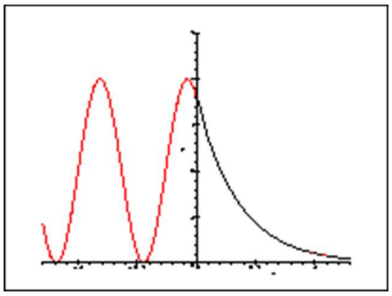


Figura 6: Graficas de la *densidad de probabilidad* $|\psi(x)|^2$ para el problema de la barrera de potencial. Aqui $\hbar = 1, m = 1, V = 10, E = 9$ y $B_1 = 1$ ($\psi(x)$ no normalizada)

En este ejemplo tenemos en la primera región tanto una onda incidente como una onda reflejada. A diferencia del caso clásico, la partícula no rebota elásticamente, sino que tiene una cierta probabilidad de traspaso y una cierta probabilidad de reflexión.

Potencial Periodico

Una aplicación muy interesante es la de un potencial que se repite con regularidad. Esta situación física se encuentra por supuesto en los cristales, y en particular en los metales. En este caso las soluciones de la ecuación de Schrödinger son tales que aparecen bandas de energías permitidas y bandas de energías no permitidas. Las anchuras de los gaps determinan las propiedades físicas de los materiales en cuestión. Determinan por ejemplo si el material es conductor, aislante o semiconductor.

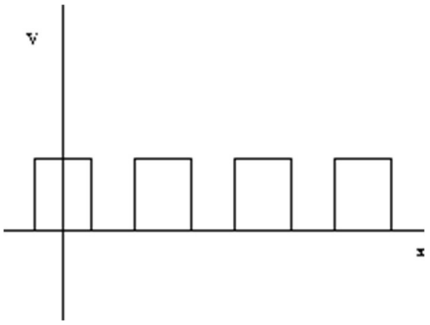


Figura 8: Ejemplo de un Potencial Periodico

El potencial correspondiente a un potencial periodico tiene la propiedad

$$V(x + a) = V(x)$$

$$V(x + na) = V(x), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Podemos considerar el problema como el problema de una celda típica que se repite. De esta forma, la función de onda correspondiente a cada celda debe ser, salvo un factor de fase, igual a la función de onda de cualquier otra celda. Esto se expresa por medio de la relación

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x)$$

$$\psi(x+na) = \lambda^n\psi(x)$$

$$\lambda = e^{iKa}, \qquad \text{fase constante}$$

Como $e^{2\pi in} = 1$ podemos reducir los valores de la constante K al intervalo $-\frac{\pi}{a} \leq K \leq +\frac{\pi}{a}$ (zona de Brillouin). La condición de que $\psi(x)$ tiene que ser de la forma

$$\psi(x+na) = e^{inKa}\psi(x)$$

solo puede satisfacerse si

$$\psi(x) = e^{iKx}u_k(x),$$

con una función periódica

$$u_k(x) = u_k(x+a).$$

A este resultado se le conoce como el Teorema de Bloch.

Teorema de Bloch

El teorema de Bloch describe el movimiento de los electrones en un sólido. Fue enunciado por el físico suizo Felix Bloch basándose en la idea de que un sólido posee una estructura microscópica periódica. A partir de esta hipótesis, el teorema establece de qué manera deben ser las funciones de onda de los electrones, y permite tratar el movimiento de todos los electrones analizando únicamente el movimiento de un solo electrón.

Hipótesis

El teorema de Bloch describe el movimiento de los electrones en un sólido, basándose en las siguientes hipótesis:

- Los átomos del cristal forman una estructura periódica, y tienen la periodicidad de los puntos de una red de Bravais denotados por el vector r
- Debido al ordenamiento de los átomos, el potencial del cristal es una función periódica que cumple $U(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$para todo vector de traslación R de la red.

- Los electrones son independientes, no interactúan entre sí y cada uno satisface la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico.

Expresión matemática

Partiendo de estas bases, el teorema de Bloch establece que los autoestados ψ de un electrón vienen dados por el producto de una onda plana y una función periódica en R llamada función de Bloch, es decir:
$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
(Autoestado del electrón) = (onda plana) x (función periódica, llamada función de Bloch)

En la anterior ecuación la letra K representa el vector de onda, y la función de Bloch, $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, puede ser una función periódica cualquiera, cuya periodicidad R es la misma que la de la red cristalina. La función de Bloch viene determinada por la resolución de la ecuación de Schrödinger, sin embargo, no es necesario saber la forma analítica de esta función para abordar el tratamiento de un sólido. Es más, haciendo uso de su periodicidad se tiene que $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ e modo que la ecuación anterior se puede reescribir como
$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

Nótese que como la forma analítica de la función periódica que multiplica a la onda plana es desconocida y además irrelevante, bien podría ser ésta $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en lugar de . Así pues, en la anterior ecuación sigue cumpliéndose que:

(Autoestado del electrón) = (onda plana) x (función periódica, llamada función de Bloch)
Estas dos ecuaciones son por tanto equivalentes, y son usadas indistintamente para referirse al teorema de Bloch.

Significado físico

Para entender el significado físico del teorema de Bloch es necesario comprender primero el del cuasimomento. Ya se ha introducido antes que la letra K representa el vector de ondas del electrón, también llamado cuasimomento. Para entender qué simboliza, es necesario recordar que un electrón libre viene representado por el siguiente autoestado
$\psi_{\mathbf{k},libre}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}$
que representa una onda plana que transporta una cantidad de movimiento igual a $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. De este modo, se puede apreciar que la función de onda de un electrón contenido en un sólido es la de un electrón libre, pero en este caso modulada por una función periódica que está relacionada con la estructura del sólido (y es la

llamada función de Bloch). En el caso de un electrón contenido en el sólido, no necesariamente se cumple la relación $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, y aunque el cuasimomento K es siempre constante, la cantidad de movimiento p no siempre lo es. Por esto, no debe confundirse el cuasimomento con la cantidad de movimiento.

Sin embargo, en las expresiones del teorema de Bloch, el cuasimomento k no solo aparece en la exponencial, si no también como subíndice de las funciones. Esto se debe a que k es también un número cuántico que proviene de considerar que el sólido es finito, y de imponerle las condiciones de contorno de Born-von Karman. Estas condiciones de contorno establecen que si el sólido tiene N átomos, el átomo N + 1 será equivalente al átomo número 1, de modo que se pasa de tratar un sólido finito, a tratar un sólido periódico e infinito. Al resolver las ecuaciones de contorno se tiene que este número cuántico “etiqueta” al electrón, y por este motivo se usa como subíndice en los autoestados del electrón $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

El teorema de Bloch es de gran utilidad porque permite simplificar enormemente el tratamiento de un sólido, ya que la tercera hipótesis implica que todos los electrones se comportan igual. De manera que, para tratar el movimiento de todos los electrones del sólido, basta con resolver la ecuación de Schrödinger para un único electrón que tenga una función de ondas de la forma indicada por Bloch.

Cuestionario:

1.- Una partícula A está descrita por la función de onda c(1.x, y, z). La partícula -B está descrita por la función de onda $f(x, y, z)^{eif}$, donde f es una constante real. ¿Cómo se compara la probabilidad de encon- trar la partícula 2.A dentro de un volumen dV en un punto del espacio con la probabilidad de encontrar la partícula -B dentro de ese mismo volumen?

2.- ¿Cuáles son las diferencias más importantes entre el modelo de Bohr para el átomo de hidrógeno y el análisis de Schrödinger? ¿Cuáles son las semejanzas?

3.- Para un cuerpo que gira alrededor del Sol, como un planeta, cometa o asteroide, ¿hay alguna restricción sobre la componente z de su momento angular orbital, tal como habría con la componente z del momento angular orbital del electrón en el hidrógeno? Explique por qué.

4.- ¿Por qué el análisis del átomo de helio es mucho más complicado que el del átomo de hidrógeno, tanto en un modelo del tipo de Bohr como cuando se usa la ecuación de Schrödinger?

5.- El experimento de Stern-Gerlach siempre se realiza con haces de átomos neutros. ¿No sería más fácil utilizar haces con átomos ionizados? ¿Por qué no funcionaría esto?

6.- a) Si dos electrones en átomos de hidrógeno tienen el mismo número cuántico principal, ¿pueden tener diferentes cantidades de momento angular orbital? ¿Cómo?
b) Si dos electrones en átomos de hidrógeno tienen el mismo número cuántico de momento angular orbital, ¿pueden tener diferentes números cuánticos principales? ¿Cómo?

7.- En el experimento de Stern-Gerlach, ¿por qué es esencial que el campo magnético sea no homogéneo, es decir, no uniforme?

8.- En el estado base del átomo de helio, un electrón debe tener el “espín abajo” y el otro el “espín arriba”. ¿Por qué?

Debate 34. Teoría Cuántica. Átomos hidrogenoides

- Spin del electrón
  https://www.youtube.com/watch?v=6Ybw46F7RTo

- Átomo Hidrogenoide:
  https://www.youtube.com/watch?v=Uzs7avWTx48

Átomo hidrogenoide

Los átomos hidrogenoides son átomos formados por un núcleo y un solo electrón. Se llaman así porque son isoelectrónicos con el átomo de hidrógeno y, por tanto, tendrán un comportamiento químico similar.

Evidentemente, cualquiera de los isótopos del hidrógeno es hidrogenoide. Un caso típico de átomo hidrogenoide es también el de un átomo de cualquier elemento que se ha ionizado hasta perder todos los electrones menos uno (por ejemplo, He^{+}, Li^{2+},

Be^{3+} y B^{4+}). Existen además multitud de átomos exóticos que también tienen un comportamiento hidrogenoide por motivos diversos.

Como en el caso del átomo de hidrógeno los átomos hidrogenoides son uno de los pocos problemas mecano-cuánticos que se pueden resolver de forma exacta. Los átomos o iones cuya capa de valencia está constituida por un único electrón (por ejemplo en los metales alcalinos) tienen propiedades espectroscópicas y de enlace semejantes a las de los átomos hidrogenoides.

La configuración electrónica más simple posible es la de un único electrón. La resolución analítica del átomo de hidrógeno neutro que posee la misma cantidad de electrones, es decir uno, es en esencia la misma para los átomos hidrogenoides. Así pues la forma de los orbitales y los niveles de energía serán semejantes.

Por el contrario, para átomos con dos o más electrones la resolución de las ecuaciones solo se puede hacer mediante métodos aproximativos. Los orbitales de átomos multielectrónicos son cualitativamente similares a los orbitales del hidrógeno y, en los modelos atómicos más simples, se considera que tienen la misma forma. Pero si se pretende realizar un cálculo riguroso y preciso se tendrá que recurrir a aproximaciones numéricas.

Los orbitales de los átomos hidrogenoides se identifican mediante tres números cuánticos: n, l, y m. Las reglas que restringen los valores de los números cuánticos y sus energías explican la configuración electrónica de los átomos y la conformación de la tabla periódica.

Los estados estacionarios (estados cuánticos) de los átomos hidrogenoides son sus orbitales atómicos. A pesar de todo, en general, el comportamiento de un electrón no está plenamente descrito por un orbital simple. Los estados electrónicos se representan mejor como "mezclas" dependientes del tiempo (combinaciones lineales) de varios orbitales. Orbitales moleculares por combinación lineal de orbitales atómicos.

El número cuántico n apareció por primera vez en el modelo atómico de Bohr. Determina, entre otras cosas, la distancia de los electrones con respecto al núcleo. Todos los electrones con el mismo valor de n forman un nivel o capa. Los electrones con idéntico número n pero diferente l componen los llamados subniveles o subcapas. El modelo atómico de Sommerfeld que incorporaba un refinamiento relativista del electrón probó que la energía dependía también de los otros números cuánticos tal como se aprecia en la solución relativista mediante la ecuación de Dirac.

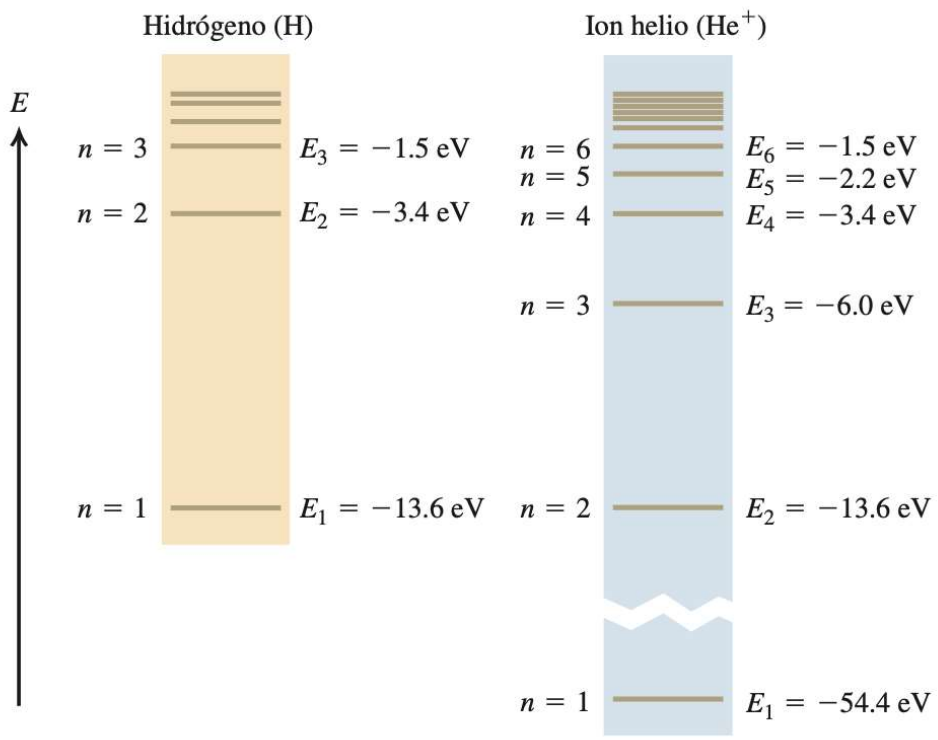
- La ecuación más bella de la física, la ecuación de Dirac https://www.youtube.com/watch?v=Lga-oupKJx4 8 minutos
- ¿Qué explica la Ecuación de Dirac? https://www.youtube.com/watch?v=tXdUZQuzQtY 5 minutos

Átomos hidrogenoides

Es posible extender el modelo de Bohr a otros átomos de un electrón, tales como el helio simplemente ionizado (He^+), el litio doblemente ionizado (Li^{2+}), y así sucesivamente. Estos átomos se llaman átomos *hidrogenoides*. En estos átomos, la carga nuclear no es e sino Ze, donde Z es el *número atómico*, igual al número de protones en el núcleo. El efecto en el análisis anterior es reemplazar e^2 en todas partes por Ze^2. En particular, los radios orbitales r_n dados por la ecuación (39.8) serán menores por un factor de Z, y los niveles de energía E_n dados por la ecuación (39.14) se multiplican por Z^2. Le invitamos a comprobar estas afirmaciones. La corrección de masa reducida en estos casos es incluso de menos del 0.1% debido a que los núcleos son más masivos que el único protón del hidrógeno ordinario. La figura 39.27 compara los niveles de energía de H y de He^+, que tiene $Z = 2$.

Los átomos de los metales alcalinos (en el extremo izquierdo de la tabla periódica; véase el apéndice D) tienen un electrón fuera de la coraza formada por el núcleo y los electrones internos, con carga neta de la coraza $+e$. Estos átomos son aproximadamente hidrogenoides, especialmente en niveles excitados. Los físicos han estudiado átomos alcalinos en los que el electrón exterior se ha excitado en una órbita muy grande, con $n = 1000$. De acuerdo con la ecuación (39.8), el radio de un *átomo de Rydberg* con $n = 1000$ es $n^2 = 10^6$ veces el radio de Bohr, o alrededor de 0.05 mm, aproximadamente el mismo tamaño de un pequeño grano de arena.

Aunque el modelo de Bohr predijo los niveles de energía del átomo de hidrógeno correctamente, planteó tantas preguntas como respuestas. Se combinaron elementos de la física clásica con nuevos postulados que eran incompatibles con las ideas clásicas. El modelo no proporcionó información sobre lo que ocurre durante una transición de una órbita a otra; las rapideces angulares del movimiento de los electrones no eran, en general, las frecuencias angulares de la radiación emitida, un resultado que es contrario a la electrodinámica clásica. Los intentos de extender el modelo a átomos con dos o más electrones no tuvieron éxito. Un electrón que se mueve en una órbita circular de Bohr forma un circuito de corriente y debería producir un momento dipolar magnético (véase la sección 27.7). Sin embargo, un átomo de hidrógeno en su nivel fundamental *no* tiene momento magnético debido al movimiento orbital. En los capítulos 40 y 41 se verá que se necesitaba una salida aún más radical a partir de los conceptos clásicos antes de que pudiera progresar más la comprensión de la estructura atómica.



39.27 Niveles de energía de H y He^+. La expresión para la energía, ecuación (39.14), se multiplica por $Z^2 = 4$ para He^+, por lo que la energía de un ion de He^+ con una n dada es casi exactamente cuatro veces la de un átomo de H con la misma n. (Hay pequeñas diferencias del orden de 0.05% debido a que las masas reducidas son ligeramente diferentes).

Caracterización Matemática

La caracterización de los átomos hidrogenoides se realiza en el marco de la mecánica cuántica, ya que debido a las dimensiones de dichos sistemas físicos ni la mecánica clásica que describe adecuadamente el movimiento de partículas macroscópicas a velocidades moderadas, ni el electromagnetismo clásico son aplicables a escalas tan pequeñas. Dentro de la mecánica cuántica una primera aproximación se obtiene mediante la ecuación de Schrödinger que predice cualitativamente todas las características importantes de los estados estacionarios de los átomos hidrogenoides y perimte obtener valores cuantitativos muy precisos para casi todas las magnitudes. Un refinamiento de este tratamiento es el análisis

relativista mediante la ecuación de Dirac que predice pequeñas correcciones a las soluciones obtenidas del análisis no-relativista mediante la ecuación de Schrödinger.

Potencial electrostático

Los orbitales atómicos de los átomos hidrogenoides son las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el caso de un potencial de simetría esférica. En este caso, el término de potencial es el potencial de la ley de Coulomb:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

donde:

- ε0 es la permitividad del vacío,
- Z es el número atómico,
- e es la carga elemental,
- r es la distancia entre el electrón y el núcleo.

Función de onda no relativista

Debido a que el potencial tiene simetría esférica es posible separar el movimiento del centro de masas del movimiento relativo entre electrón y núcleo. Así, el movimiento relativo se puede tratar como el movimiento de una partícula cuya masa es la masa reducida, μ, del sistema. De esta manera, la función de onda es una función de sólo tres variables espaciales. Tras eliminar la dependencia temporal, la ecuación de Schrödinger es una ecuación en derivadas parciales de tres variables. Debido a que el potencial tiene simetría esférica es conveniente utilizar las coordenadas esféricas para obtener las soluciones, aplicando para ello el método de separación de variables. De esta forma cualquier autofunciónψ puede escribirse como un producto de tres funciones que suelen escribirse de la forma siguiente:

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)f(\theta)g(\phi)$$

donde θ representa el ángulo polar (colatitud) y ϕ, el ángulo azimutal.

De acuerdo con la interpretación probabilística de la función de onda, ésta deberá estar normalizada a 1, por lo que se añadirá una constante de normalización. El resto de la ecuación se separa entre la parte radial representada por la función de onda radial que incorporará la constante de normalización y la angular representada por los armónicos esféricos. Todas estas funciones serán dependientes de los tres números cuánticos antes citados, n, l y m. Así, se tiene lo siguiente:

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

Los **números cuánticos** no son independientes unos de otros por lo que el número de combinaciones posibles de estas funciones está limitado. Las restricciones son las siguientes:

$n = 1, 2, 3, \ldots$

$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$

$m = -l, -(l-1), \ldots, 0, \ldots, l-1, l$

La **función radia**l ya normalizada se representa como:

$$R_{nl}(r) = \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]}\right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{na_\mu}\right)^{l+3/2} r^l e^{-\frac{Zr}{na_\mu}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_\mu}\right)$$

Siendo $L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_\mu}\right)$ las funciones asociadas de Laguerre y $a_\mu = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$.

Nótese que a_μ es aproximadamente igual al radio de Bohr, a_0. Si la masa del núcleo es infinita entonces $a_\mu = a_0$ y $a_\mu = a_0$.

Sin embargo, es más habitual encontrar las autofunciones expresadas en función de la **función radial reducida**: $P_{nl} = rR_{nl}$

Así pues **la función de onda** queda como sigue:

$$\psi_{nlm}(\theta,\phi,r) = \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\phi) = -\left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]}\right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{na_\mu}\right)^{l+3/2} r^l e^{-\frac{Zr}{na_\mu}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_\mu}\right) Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

Niveles de energía no relativista

En el caso de los átomos hidrogenoides al no haber interacciones entre electrones, pues solo hay uno, la energía de los orbitales atómicos puede ser calculada analíticamente de forma exacta. Los valores de energía permitidos son

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}\frac{Z^2}{2n^2}$$

Habitualmente se considera $\mu = m_e$, por lo que los valores de energía se expresan como:

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2}E_h$$

donde E_h es la unidad atómica de energía o Hartree. Como se puede ver, la fórmula solo depende del número cuántico principal. Esto confiere a los diferentes estados de energía lo que se denomina degeneración accidental. Por ejemplo para n = 2 existen cuatro estados posibles, <n,l,m> = <2,0,0>, <2,1,0>, <2,1,+1> y <2,1,-1>, con la misma energía para l=0 que para l=1. Pero dado que la función de energía solo depende de n y no de l, todos ellos tendrán, en principio, la misma energía (**la degeneración en m es consecuencia de la invariancia bajo**

rotaciones de todos los potenciales centrales). Esta aproximación en la medida de los niveles de energía recibe el nombre de **estructura gruesa**. Sin embargo, el hecho de que la degeneración sea accidental es debido a que no aparece para otros potenciales centrales, sino justo para un potencial que decaiga exactamente como el de Coulomb, o sea, exactamente con el inverso de la distancia. Clásicamente esta dependencia con la distancia en la energía potencial hace que se pueda construir una cantidad vectorial **(el vector de Runge-Lenz)** que permanece constante en el movimiento. Cuánticamente, las componentes del operador vectorial que representan al observable de Runge-Lenz no conmutan con el momento angular orbital al cuadrado, lo cual garantiza que tengamos estados linealmente independientes con el mismo autovalor de la energía y diferente autovalor del momento angular orbital al cuadrado: o sea, lo que hemos llamado degeneración accidental. En realidad, existen tres correcciones distintas que hacen variar sensiblemente el valor de la energía de dichos niveles rompiendo esa degeneración. Es la **denominada estructura fina del átomo de hidrógeno o hidrogenoide**. En los átomos multielectrónicos en la aproximación de campo central, el potencial "apantallado" que sienten los electrones y que tiene en cuenta en parte la repulsión interelectrónica ya no es Coulomb (no decae con el inverso de la distancia al núcleo) y no hay degeneración accidental.

Función de onda relativista

La ecuación de Schrödinger aplicada a electrones es sólo una aproximación no relativista a la ecuación de Dirac que da cuenta tanto del efecto del spin del electrón. En el tratamiento de Dirac de los electrones de hecho la función de onda debe substituirse por un espinor de cuatro componentes:

$$\psi^{(\pm)}_{n,jm}(r,\theta,\phi) = \begin{Bmatrix} \dfrac{iG_{n,lj}(r)}{r}\boldsymbol{\varphi}^{(\pm)}_{jm} \\ \dfrac{F_{n,lj}(r)}{r}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{r}})\boldsymbol{\varphi}^{(\pm)}_{jm} \end{Bmatrix}$$

Donde las funciones F y G se expresan en términos de funciones hipergeométricas:

$$F_{n,lj}(r) = \left(1+\frac{E}{mc^2}\right)e^{-\frac{\rho}{2}}\left(F_1(\rho)+F_2(\rho)\right), \qquad G_{n,lj}(r) = \left(1-\frac{E}{mc^2}\right)e^{-\frac{\rho}{2}}\left(F_1(\rho)-F_2(\rho)\right),$$

A modo de comparación con el caso no relativista se dan a continuación la forma explícita del espinor de funciones de onda del estado fundamental:

$$\psi_{n=1,j=\frac{1}{2},m=+\frac{1}{2}}(r,\theta,\phi) = \frac{(2mZ\alpha)^{3/2}}{(4\pi)^{1/2}}\left(\frac{1+\gamma}{2\Gamma(1+2\gamma)}\right)^{1/2}(2mZ\alpha r)^{\gamma-1}e^{-mZ\alpha r}\begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{i(1-\gamma)}{Z\alpha}\cos\theta \\ \dfrac{i(1-\gamma)}{Z\alpha}\sin\theta e^{i\varphi} \end{Bmatrix}$$

$$\psi_{n=1,j=\frac{1}{2},m=-\frac{1}{2}}(r,\theta,\phi) = \frac{(2mZ\alpha)^{3/2}}{(4\pi)^{1/2}}\left(\frac{1+\gamma}{2\Gamma(1+2\gamma)}\right)^{1/2}(2mZ\alpha r)^{\gamma-1}e^{-mZ\alpha r}\begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{i(1-\gamma)}{Z\alpha}\sin\theta e^{-i\varphi} \\ \frac{i(1-\gamma)}{Z\alpha}\cos\theta \end{Bmatrix}$$

El límite no relativista se obtiene haciendo tender $\gamma := \sqrt{1-Z^2\alpha^2} \to 1$, es decir, haciendo tender la constante de estructura fina a cero.

Niveles de Energía Relativista

El tratamiento de los electrones mediante la ecuación de Dirac solo supone pequeñas correcciones a los niveles dados por la ecuación de Schrödinger. Tal vez el efecto más interesante es la desaparición de la degeneración de los niveles, por el efecto de la interacción espín-órbita consistente en que los electrones con valores diferentes del tercer número cuántico m (número cuántico magnético) tienen diferentes energía debido al efecto sobre ellos del momento magnético del núcleo atómico. De hecho los niveles energéticos vienen dados por:

$$E_n - m_e c^2 \approx \frac{m_e c^2}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n-|m|+\sqrt{m^2+(Z\alpha)^2}}\right)^2$$

Donde:
m_e es la masa del electrón.
c α son la velocidad de la luz y la constante de estructura fina.
Z, n, m son el número de protones del núcleo, el número cuántico principal y el número cuántico magnético.

Si se prescinde de la energía asociada a la masa en reposo del electrón estos niveles pueden resultan cercanos a los predichos por la ecuación de Schrödinger, especialmente en el caso m = 0:

$$E_n - m_e c^2 \approx \frac{m_e c^2}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n-|m|+\sqrt{m^2+(Z\alpha)^2}}\right)^2$$

Correcciones de espín

Además de las correcciones relativistas simples, en un átomo hidrogenoide pueden existir correcciones debidas a la interacción del espín electrónico con el momento magnético del núcleo, cuando este no es perfectamente esférico. (ver correcciones de espín).

Cuestionario:

1.- ¿Que es un átomo Hidrogenoide?

2.- ¿Cuál es la constante de Rydberg y que representa?

3.- ¿Qué son los números cuánticos?

4.- ¿Qué son los orbitales atómicos?

5.- ¿Que es REEMPE

6.- ¿Qué es el SPIN?

7.- ¿Qué es la constante de estructura fina y de donde podemos deducirla?

Debate 35. Teoría cuántica de los átomos

- números cuánticos 14:52
  https://www.youtube.com/watch?v=zwisiN5XWh8

- Ejercicios números cuánticos 7:45
  https://www.youtube.com/watch?v=2ymgb48a21U

- Configuración electrónica 17:03
  https://www.youtube.com/watch?v=4MMvumKmqs4

- Configuración electrónica, comparación de radios y electronegatividad 13:39
  https://www.youtube.com/watch?v=L24sB0RO878

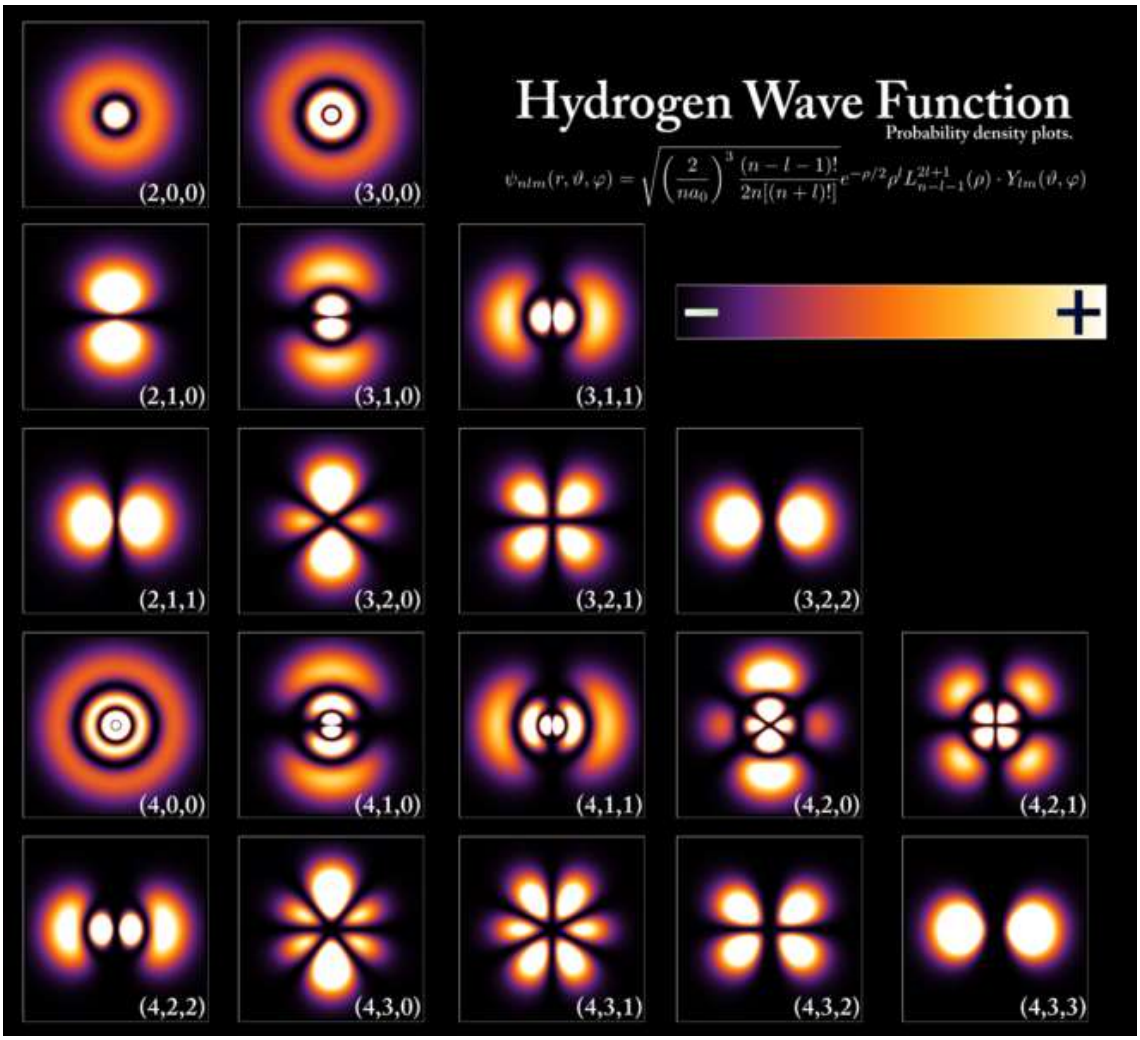
TEORÍA CUÁNTICA DE LOS ÁTOMOS

La mecánica cuántica es la rama de la física que estudia la naturaleza a escalas espaciales pequeñas, los sistemas atómicos y subatómicos y sus interacciones con la radiación electromagnética, en términos de cantidades observables. Se basa en la observación de que todas las formas de energía se liberan en unidades discretas o paquetes llamados cuantos. Sorprendentemente, la teoría cuántica solo permite normalmente cálculos probabilísticos o estadísticos de las características observadas de las partículas elementales, entendidos en términos de funciones de onda. La ecuación de Schrödinger desempeña el papel en la mecánica cuántica que las leyes de Newton y la conservación de la energía hacen en la mecánica clásica. Es decir, la predicción del comportamiento futuro de un sistema dinámico y es una ecuación de onda en términos de una función de onda la que predice analíticamente la probabilidad precisa de los eventos o resultados.

En teorías anteriores de la física clásica, la energía era tratada únicamente como un fenómeno continuo, en tanto que la materia se supone que ocupa una región muy concreta del espacio y que se mueve de manera continua. Según la teoría cuántica, la energía se emite y se absorbe en cantidades discretas y minúsculas. Un paquete individual de energía, llamado cuanto, en algunas situaciones se comporta como una partícula de materia. Por otro lado, se encontró que las partículas exponen algunas propiedades ondulatorias cuando están en movimiento y ya no son vistas como localizadas en una región determinada, sino más bien extendidas en cierta medida. La luz u otra radiación emitida o absorbida por un átomo solo tiene ciertas frecuencias (o longitudes de onda), como puede verse en la línea del espectro asociado al elemento químico representado por tal átomo. La teoría cuántica demuestra que tales frecuencias corresponden a niveles definidos de los cuantos de luz, o fotones, y es el resultado del hecho de que los electrones del átomo solo pueden tener ciertos valores de energía permitidos. Cuando un electrón pasa de un nivel permitido a otro, una cantidad de energía es emitida o absorbida, cuya frecuencia es directamente proporcional a la diferencia de energía entre los dos niveles.

La mecánica cuántica surge tímidamente en los inicios del siglo xx dentro de las tradiciones más profundas de la física para dar una solución a problemas para los que las teorías conocidas hasta el momento habían agotado su capacidad de explicar, como la llamada catástrofe ultravioleta en la radiación de cuerpo negro predicha por la física estadística clásica y la inestabilidad de los átomos en el modelo atómico de Rutherford. La primera propuesta de un principio propiamente cuántico se debe a Max Planck en 1900, para resolver el problema de la radiación de cuerpo negro, que fue duramente cuestionado, hasta que Albert Einstein lo

convierte en el principio que exitosamente pueda explicar el efecto fotoeléctrico. Las primeras formulaciones matemáticas completas de la mecánica cuántica no se alcanzan hasta mediados de la década de 1920, sin que hasta el día de hoy se tenga una interpretación coherente de la teoría, en particular del problema de la medición.



Funciones de onda del electrón en un átomo de hidrógeno a diferentes niveles de energía. La mecánica cuántica no puede predecir la ubicación exacta de una partícula en el espacio, solo la probabilidad de encontrarla en diferentes lugares. Las áreas más brillantes representan una mayor probabilidad de encontrar el electrón.

El formalismo de la mecánica cuántica se desarrolló durante la década de 1920. En 1924, Louis de Broglie propuso que, al igual que las ondas de luz presentan propiedades de partículas, como ocurre en el efecto fotoeléctrico, las partículas, también presentan propiedades ondulatorias. Dos formulaciones diferentes de la

mecánica cuántica se presentaron después de la sugerencia de Broglie. En 1926, la mecánica ondulatoria de Erwin Schrödinger implica la utilización de una entidad matemática, la función de onda, que está relacionada con la probabilidad de encontrar una partícula en un punto dado en el espacio. En 1925, la mecánica matricial de Werner Heisenberg no hace mención alguna de las funciones de onda o conceptos similares, pero ha demostrado ser matemáticamente equivalente a la teoría de Schrödinger. Un descubrimiento importante de la teoría cuántica es el principio de incertidumbre, enunciado por Heisenberg en 1927, que pone un límite teórico absoluto en la precisión de ciertas mediciones. Como resultado de ello, la asunción clásica de los científicos de que el estado físico de un sistema podría medirse exactamente y utilizarse para predecir los estados futuros tuvo que ser abandonada. Esto supuso una revolución filosófica y dio pie a numerosas discusiones entre los más grandes físicos de la época.

La mecánica cuántica propiamente dicha no incorpora a la relatividad en su formulación matemática. La parte de la mecánica cuántica que incorpora elementos relativistas de manera formal para abordar diversos problemas se conoce como mecánica cuántica relativista o ya, en forma más correcta y acabada, teoría cuántica de campos (que incluye a su vez a la electrodinámica cuántica, cromodinámica cuántica y teoría electrodébil dentro del modelo estándar)1 y más generalmente, la teoría cuántica de campos en espacio-tiempo curvo. La única interacción elemental que no se ha podido cuantizar hasta el momento ha sido la interacción gravitatoria. Este problema constituye entonces uno de los mayores desafíos de la física del siglo xxi. La mecánica cuántica se combinó con la teoría de la relatividad en la formulación de Paul Dirac de 1928, lo que, además, predijo la existencia de antipartículas. Otros desarrollos de la teoría incluyen la estadística cuántica, presentada en una forma por Einstein y Bose (la estadística de Bose-Einstein) y en otra forma por Dirac y Enrico Fermi (la estadística de Fermi-Dirac); la electrodinámica cuántica, interesada en la interacción entre partículas cargadas y los campos electromagnéticos, su generalización, la teoría cuántica de campos y la electrónica cuántica.

La mecánica cuántica proporciona el fundamento de la fenomenología del átomo, de su núcleo y de las partículas elementales (lo cual requiere necesariamente el enfoque relativista). También su impacto en teoría de la información, criptografía y química ha sido decisivo entre esta misma.

Contexto histórico

La mecánica cuántica es, cronológicamente hablando, la última de las grandes ramas de la física. Se formuló a principios del siglo xx, casi al mismo tiempo que la teoría de la relatividad, aunque el grueso de la mecánica cuántica se desarrolló a partir de 1920 (siendo la teoría de la relatividad especial de 1905 y la teoría general de la relatividad de 1915).

Además al advenimiento de la mecánica cuántica existían diversos problemas no resueltos en la electrodinámica clásica. El primero de estos problemas era la emisión de radiación de cualquier objeto en equilibrio, llamada radiación térmica, que es la que proviene de la vibración microscópica de las partículas que lo componen. Usando las ecuaciones de la electrodinámica clásica, la energía que emitía esta radiación térmica tendía al infinito, si se suman todas las frecuencias que emitía el objeto, con ilógico resultado para los físicos. También la estabilidad de los átomos no podía ser explicada por el electromagnetismo clásico, y la noción de que el electrón fuera o bien una partícula clásica puntual o bien una cáscara esférica de dimensiones finitas resultaban igualmente problemáticas para esto.

Radiación electromagnética

El problema de la radiación electromagnética de un cuerpo negro fue uno de los primeros problemas resueltos en el seno de la mecánica cuántica. Es en el seno de la mecánica estadística donde surgen por primera vez las ideas cuánticas en 1900. Al físico alemán Max Planck se le ocurrió un artificio matemático: si en el proceso aritmético se sustituía la integral de esas frecuencias por una suma no continua (discreta), se dejaba de obtener infinito como resultado, con lo que se eliminaba el problema; además, el resultado obtenido concordaba con lo que después era medido.

Fue Max Planck quien entonces enunció la hipótesis de que la radiación electromagnética es absorbida y emitida por la materia en forma de «cuantos» de luz o fotones de energía cuantizados introduciendo una constante estadística, que se denominó constante de Planck. Su historia es inherente al siglo xx, ya que la primera formulación cuántica de un fenómeno fue dada a conocer por el mismo Planck el 14 de diciembre de 1900 en una sesión de la Sociedad Física de la Academia de Ciencias de Berlín.

La idea de Planck habría permanecido muchos años solo como hipótesis sin verificar por completo si Albert Einstein no la hubiera retomado, proponiendo que la luz, en ciertas circunstancias, se comporta como partículas de energía (los cuantos de luz o fotones) en su explicación del efecto fotoeléctrico. Fue Albert Einstein quien completó en 1905 las correspondientes leyes del movimiento su teoría especial de la relatividad, demostrando que el electromagnetismo era una teoría esencialmente no mecánica. Culminaba así lo que se ha dado en llamar física clásica, es decir, la física no-cuántica.

Usó este punto de vista llamado por él «heurístico», para desarrollar su teoría del efecto fotoeléctrico, publicando esta hipótesis en 1905, lo que le valió el Premio Nobel de Física de 1921. Esta hipótesis fue aplicada también para proponer una teoría sobre el calor específico, es decir, la que resuelve cuál es la cantidad de calor

necesaria para aumentar en una unidad la temperatura de la unidad de masa de un cuerpo.

El siguiente paso importante se dio hacia 1925, cuando Louis De Broglie propuso que cada partícula material tiene una longitud de onda asociada, inversamente proporcional a su masa, y a su velocidad. Así quedaba establecida la dualidad onda/materia. Poco tiempo después Erwin Schrödinger formuló una ecuación de movimiento para las «ondas de materia», cuya existencia había propuesto De Broglie y varios experimentos sugerían que eran reales.

La mecánica cuántica introduce una serie de hechos contraintuitivos que no aparecían en los paradigmas físicos anteriores; con ella se descubre que el mundo atómico no se comporta como esperaríamos. Los conceptos de incertidumbre o cuantización son introducidos por primera vez aquí. Además la mecánica cuántica es la teoría científica que ha proporcionado las predicciones experimentales más exactas hasta el momento, a pesar de estar sujeta a las probabilidades.

Inestabilidad de los átomos clásicos

El segundo problema importante que la mecánica cuántica resolvió a través del modelo de Bohr, fue el de la estabilidad de los átomos. De acuerdo con la teoría clásica un electrón orbitando alrededor de un núcleo cargado positivamente debería emitir energía electromagnética perdiendo así velocidad hasta caer sobre el núcleo. La evidencia empírica era que esto no sucedía, y sería la mecánica cuántica la que resolvería este hecho primero mediante postulados ad hoc formulados por Bohr y más tarde mediante modelos como el modelo atómico de Schrödinger basados en supuestos más generales. A continuación se explica el fracaso del modelo clásico.

En mecánica clásica, un átomo de hidrógeno es un tipo de problema de los dos cuerpos en que el protón sería el primer cuerpo que tiene más del 99% de la masa del sistema y el electrón es el segundo cuerpo que es mucho más ligero. Para resolver el problema de los dos cuerpos es conveniente hacer la descripción del sistema, colocando el origen del sistema de referencia en el centro de masa de la partícula de mayor masa, esta descripción es correcta considerando como masa de la otra partícula la masa reducida que viene dada por

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx 0,999 m_e$$

Siendo m_p la masa del protón y m_e la masa del electrón. En ese caso el problema del átomo de hidrógeno parece admitir una solución simple en la que el electrón se moviera en órbitas elípticas alrededor del núcleo atómico. Sin embargo, existe un problema con la solución clásica, de acuerdo con las predicciones de electromagnetismo partícula eléctrica que sigue un movimiento acelerado, como

sucedería al describir una elipse debería emitir radiación electromagnética, y por tanto perder energía cinética, la cantidad de energía radiada sería de hecho:

$$\frac{dE_r}{dt} = \frac{e^2 a^2 \gamma^4}{6\pi\epsilon_0 c^3} \approx \frac{\pi}{96} \frac{e^{14} m_e^2 \gamma^4}{\epsilon_0^7 h^8 c^3} \geq 5,1 \cdot 10^{-8} \text{watt}$$

Ese proceso acabaría con el colapso del átomo sobre el núcleo en un tiempo muy corto dadas las grandes aceleraciones existentes. A partir de los datos de la ecuación anterior el tiempo de colapso sería de 10-8 s, es decir, de acuerdo con la física clásica los átomos de hidrógeno no serían estables y no podrían existir más de una cienmillonésima de segundo.

Esa incompatibilidad entre las predicciones del modelo clásico y la realidad observada llevó a buscar un modelo que explicara fenomenológicamente el átomo. El modelo atómico de Bohr era un modelo fenomenológico y provisorio que explicaba satisfactoriamente aunque de manera heurística algunos datos, como el orden de magnitud del radio atómico y los espectros de absorción del átomo, pero no explicaba cómo era posible que el electrón no emitiera radiación perdiendo energía. La búsqueda de un modelo más adecuado llevó a la formulación del modelo atómico de Schrödinger en el cual puede probarse que el valor esperado de la aceleración es nulo, y sobre esa base puede decirse que la energía electromagnética emitida debería ser también nula. Sin embargo, al contrario del modelo de Bohr, la representación cuántica de Schrödinger es difícil de entender en términos intuitivos.

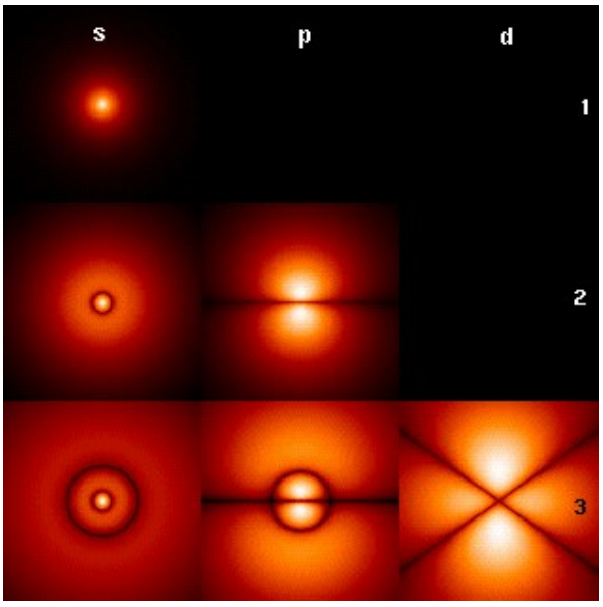


Fig. 1: La función de onda del electrón de un átomo de hidrógeno posee niveles de energía definidos y discretos denotados por un número cuántico n=1, 2, 3,... y valores definidos de momento angular caracterizados por la notación: s, p, d,... Las áreas brillantes en la figura corresponden a densidades elevadas de probabilidad de encontrar el electrón en dicha posición.

Desarrollo histórico

La teoría cuántica fue desarrollada en su forma básica a lo largo de la primera mitad del siglo xx. El hecho de que la energía se intercambie de forma discreta se puso de relieve por hechos experimentales como los siguientes, inexplicables con las herramientas teóricas anteriores de la mecánica clásica o la electrodinámica:

- Espectro de la radiación del cuerpo negro, resuelto por Max Planck con la cuantización de la energía. La energía total del cuerpo negro resultó que tomaba valores discretos más que continuos. Este fenómeno se llamó cuantización, y los intervalos posibles más pequeños entre los valores discretos son llamados quanta (singular: quantum, de la palabra latina para «cantidad», de ahí el nombre de mecánica cuántica). La magnitud de un cuanto es un valor fijo llamado constante de Planck, y que vale: 6.626 ×10-34 julios por segundo.
- Bajo ciertas condiciones experimentales, los objetos microscópicos como los átomos o los electrones exhiben un comportamiento ondulatorio, como en la interferencia. Bajo otras condiciones, las mismas especies de objetos exhiben un comportamiento corpuscular, de partícula, («partícula» quiere decir un objeto que puede ser localizado en una región concreta del espacio), como en la dispersión de partículas. Este fenómeno se conoce como dualidad onda-partícula.
- Las propiedades físicas de objetos con historias asociadas pueden ser correlacionadas, en una amplitud prohibida para cualquier teoría clásica, solo pueden ser descritos con precisión si se hace referencia a ambos a la vez. Este fenómeno es llamado entrelazamiento cuántico y la desigualdad de Bell describe su diferencia con la correlación ordinaria. Las medidas de las violaciones de la desigualdad de Bell fueron algunas de las mayores comprobaciones de la mecánica cuántica.
- Explicación del efecto fotoeléctrico, dada por Albert Einstein, en que volvió a aparecer esa "misteriosa" necesidad de cuantizar la energía.
- Efecto Compton.

El desarrollo formal de la teoría fue obra de los esfuerzos conjuntos de varios físicos y matemáticos de la época como Schrödinger, Heisenberg, Einstein, Dirac, Bohr y Von Neumann entre otros (la lista es larga). Algunos de los aspectos fundamentales de la teoría están siendo aún estudiados activamente. La mecánica cuántica ha sido también adoptada como la teoría subyacente a muchos campos de la física y la química, incluyendo la física de la materia condensada, la química cuántica y la física de partículas.

La región de origen de la mecánica cuántica puede localizarse en la Europa central, en Alemania y Austria, y en el contexto histórico del primer tercio del siglo xx.

Suposiciones más importantes

Las suposiciones más importantes de esta teoría son las siguientes:

Al ser imposible fijar a la vez la posición y el momento de una partícula, se renuncia al concepto de trayectoria, vital en la mecánica clásica. En vez de eso, el movimiento de una partícula puede ser explicado por una función matemática que asigna, a cada punto del espacio y a cada instante, la probabilidad de que la partícula descrita se halle en tal posición en ese instante (al menos, en la interpretación de la Mecánica cuántica más usual, la probabilística o interpretación de Copenhague). A partir de esa función, o función de ondas, se extraen teóricamente todas las magnitudes del movimiento necesarias.

Existen dos tipos de evolución temporal, si no ocurre ninguna medida el estado del sistema o función de onda evolucionan de acuerdo con la ecuación de Schrödinger, sin embargo, si se realiza una medida sobre el sistema, este sufre un «salto cuántico» hacia un estado compatible con los valores de la medida obtenida (formalmente el nuevo estado será una proyección ortogonal del estado original).

Existen diferencias notorias entre los estados ligados y los que no lo están.
La energía no se intercambia de forma continua en un estado ligado, sino en forma discreta lo cual implica la existencia de paquetes mínimos de energía llamados cuantos, mientras en los estados no ligados la energía se comporta como un continuo.

Descripción de la teoría

Interpretación de Copenhague

Para describir la teoría de forma general es necesario un tratamiento matemático riguroso, pero aceptando una de las tres interpretaciones de la mecánica cuántica (a partir de ahora la Interpretación de Copenhague), el marco se relaja. La mecánica cuántica describe el estado instantáneo de un sistema (estado cuántico) con una función de onda que codifica la distribución de probabilidad de todas las propiedades medibles, u observables. Algunos observables posibles sobre un sistema dado son la energía, posición, momento y momento angular. La mecánica cuántica no asigna valores definidos a los observables, sino que hace predicciones sobre sus distribuciones de probabilidad. Las propiedades ondulatorias de la materia son explicadas por la interferencia de las funciones de onda.

Estas funciones de onda pueden variar con el transcurso del tiempo. Esta evolución es determinista si sobre el sistema no se realiza ninguna medida aunque esta evolución es estocástica y se produce mediante colapso de la función de onda

cuando se realiza una medida sobre el sistema (Postulado IV de la MC). Por ejemplo, una partícula moviéndose sin interferencia en el espacio vacío puede ser descrita mediante una función de onda que es un paquete de ondas centrado alrededor de alguna posición media. Según pasa el tiempo, el centro del paquete puede trasladarse, cambiar, de modo que la partícula parece estar localizada más precisamente en otro lugar. La evolución temporal determinista de las funciones de onda es descrita por la ecuación de Schrödinger.

Algunas funciones de onda describen estados físicos con distribuciones de probabilidad que son constantes en el tiempo, estos estados se llaman estacionarios, son estados propios del operador hamiltoniano y tienen energía bien definida. Muchos sistemas que eran tratados dinámicamente en mecánica clásica son descritos mediante tales funciones de onda estáticas. Por ejemplo, un electrón en un átomo sin excitar se dibuja clásicamente como una partícula que rodea el núcleo, mientras que en mecánica cuántica es descrito por una nube de probabilidad estática que rodea al núcleo.

Cuando se realiza una medición en un observable del sistema, la función de ondas se convierte en una del conjunto de las funciones llamadas funciones propias o estados propios del observable en cuestión. Este proceso es conocido como colapso de la función de onda. Las probabilidades relativas de ese colapso sobre alguno de los estados propios posibles son descritas por la función de onda instantánea justo antes de la reducción. Considerando el ejemplo anterior sobre la partícula en el vacío, si se mide la posición de la misma, se obtendrá un valor impredecible x. En general, es imposible predecir con precisión qué valor de x se obtendrá, aunque es probable que se obtenga uno cercano al centro del paquete de ondas, donde la amplitud de la función de onda es grande. Después de que se ha hecho la medida, la función de onda de la partícula colapsa y se reduce a una que esté muy concentrada en torno a la posición observada x.

La ecuación de Schrödinger es en parte determinista en el sentido de que, dada una función de onda a un tiempo inicial dado, la ecuación suministra una predicción concreta de qué función tendremos en cualquier tiempo posterior. Durante una medida, el eigen-estado al cual colapsa la función es probabilista y en este aspecto es no determinista. Así que la naturaleza probabilística de la mecánica cuántica nace del acto de la medida.

Formulación matemática

En la formulación matemática rigurosa, desarrollada por Dirac y von Neumann, los estados posibles de un sistema cuántico están representados por vectores unitarios (llamados estados) que pertenecen a un Espacio de Hilbert complejo separable (llamado el espacio de estados). Qué tipo de espacio de Hilbert es necesario en cada caso depende del sistema; por ejemplo, el espacio de estados para los

estados de posición y momento es el espacio de funciones de cuadrado integrable , mientras que la descripción de un sistema sin traslación pero con un espín es el espacio . La evolución temporal de un estado cuántico queda descrita por la ecuación de Schrödinger, en la que el hamiltoniano, el operador correspondiente a la energía total del sistema, tiene un papel central.

Cada magnitud observable queda representada por un operador lineal hermítico definido sobre un dominio denso del espacio de estados. Cada estado propio de un observable corresponde a un eigenvector del operador, y el valor propio o eigenvalor asociado corresponde al valor del observable en aquel estado propio. El espectro de un operador puede ser continuo o discreto. La medida de un observable representado por un operador con espectro discreto solo puede tomar un conjunto numerable de posibles valores, mientras que los operadores con espectro continuo presentan medidas posibles en intervalos reales completos. Durante una medida, la probabilidad de que un sistema colapse a uno de los eigenestados viene dada por el cuadrado del valor absoluto del producto interior entre el estado propio o auto-estado (que podemos conocer teóricamente antes de medir) y el vector estado del sistema antes de la medida. Podemos así encontrar la distribución de probabilidad de un observable en un estado dado computando la descomposición espectral del operador correspondiente. El principio de incertidumbre de Heisenberg se representa por la aseveración de que los operadores correspondientes a ciertos observables no conmutan.

Relatividad y la mecánica cuántica

El mundo moderno de la física se funda notablemente en dos teorías principales, la relatividad general y la mecánica cuántica, aunque ambas teorías usan principios aparentemente incompatibles. Los postulados que definen la teoría de la relatividad de Einstein y la teoría del quántum están apoyados por rigurosa y repetida evidencia empírica. Sin embargo, ambas se resisten a ser incorporadas dentro de un mismo modelo coherente. Desde mediados del siglo xx, aparecieron teorías cuánticas relativistas del campo electromagnético (electrodinámica cuántica) y las fuerzas nucleares (modelo electrodébil, cromodinámica cuántica), pero no se tiene una teoría cuántica relativista del campo gravitatorio que sea plenamente consistente y válida para campos gravitatorios intensos (existen aproximaciones en espacios asintóticamente planos). Todas las teorías cuánticas relativistas consistentes usan los métodos de la teoría cuántica de campos.

En su forma ordinaria, la teoría cuántica abandona algunos de los supuestos básicos de la teoría de la relatividad, como por ejemplo el principio de localidad usado en la descripción relativista de la causalidad. El mismo Einstein había considerado absurda la violación del principio de localidad a la que parecía abocar la mecánica cuántica. La postura de Einstein fue postular que la mecánica cuántica si bien era consistente era incompleta. Para justificar su argumento y su rechazo a

la falta de localidad y la falta de determinismo, Einstein y varios de sus colaboradores postularon la llamada paradoja de Einstein-Podolsky-Rosen (EPR), la cual demuestra que medir el estado de una partícula puede instantáneamente cambiar el estado de su socio enlazado, aunque las dos partículas pueden estar a una distancia arbitrariamente grande. Modernamente el paradójico resultado de la paradoja EPR se sabe es una consecuencia perfectamente consistente del llamado entrelazamiento cuántico. Es un hecho conocido que si bien la existencia del entrelazamiento cuántico efectivamente viola el principio de localidad, en cambio no viola la causalidad definido en términos de información, puesto que no hay transferencia posible de información. Si bien en su tiempo, parecía que la paradoja EPR suponía una dificultad empírica para mecánica cuántica, y Einstein consideró que la mecánica cuántica en la interpretación de Copenhague podría ser descartada por experimento, décadas más tarde los experimentos de Alain Aspect (1981) revelaron que efectivamente la evidencia experimental parece apuntar en contra del principio de localidad. Y por tanto, el resultado paradójico que Einstein rechazaba como «sin sentido» parece ser lo que sucede precisamente en el mundo real.

La paradoja de Einstein-Podolsky-Rosen

Paradoja EPR es un experimento mental propuesto porAlbert Einstein, Boris Podolsky y Nathan Rosen en 1935. Es relevante históricamente, puesto que pone de manifiesto un problema aparente de la mecánica cuántica, y en las décadas siguientes se dedicaron múltiples esfuerzos a desarrollarla y resolverla.

Planteamiento teórico

Según Albert Einstein, y muchos otros científicos, la idea del entrelazamiento cuántico les resultaba extremadamente perturbadora, ya que violaban el principio de localidad. Esta particular característica de la mecánica cuántica permite preparar los estados de dos o más partículas en los cuales es imposible obtener información útil sobre el estado total del sistema haciendo sólo mediciones sobre una de las partículas. Por otro lado, en un estado entrelazado, manipulando una de las partículas, se puede modificar el estado total. Es decir, operando sobre una de las partículas se puede modificar el estado de la otra a distancia de manera instantánea. Esto habla de una correlación entre las dos partículas que no tiene lugar en el mundo de nuestras experiencias cotidianas.

El experimento planteado por EPR consiste en dos partículas que interactuaron en el pasado y que quedan en un estado entrelazado. Dos observadores reciben cada una de las partículas. Si un observador mide la inercia de una de ellas, sabe cuál es la inercia de la otra. Si mide la posición, gracias al entrelazamiento cuántico y al principio de incertidumbre, puede saber la posición de la otra partícula de forma instantánea, lo que contradice el sentido común.

La paradoja EPR está en contradicción con la teoría de la relatividad, ya que aparentemente se transmite información de forma instantánea entre las dos partículas. De acuerdo a EPR, esta teoría predice un fenómeno (el de la acción a distancia instantánea) pero no permite hacer predicciones deterministas sobre él; por lo tanto, la mecánica cuántica es una teoría incompleta.

Esta paradoja (aunque, en realidad, es más una crítica que una paradoja), critica dos conceptos cruciales: la no localidad de la mecánica cuántica (es decir, la posibilidad de acción a distancia) y el problema de la medición. En la física clásica, medir un sistema, es poner de manifiesto propiedades que se encontraban presentes en el mismo, es decir, que es una operación determinista. En mecánica cuántica, constituye un error asumir esto último. El sistema va a cambiar de forma incontrolable durante el proceso de medición, y solamente podemos calcular las probabilidades de obtener un resultado u otro.

Propuesta experimental: las desigualdades de Bell

Hasta el año 1964, este debate perteneció al dominio de la filosofía de la ciencia. En ese momento, John Bell propuso una forma matemática para poder verificar la paradoja EPR. Bell logró deducir unas desigualdades asumiendo que el proceso de medición en mecánica cuántica obedece a leyes deterministas, y asumiendo también localidad, es decir, teniendo en cuenta las críticas de EPR. Si Einstein tenía razón, las desigualdades de Bell son ciertas y la teoría cuántica es incompleta. Si la teoría cuántica es completa, estas desigualdades serán violadas.

Desde 1976 en adelante, se han llevado a cabo numerosos experimentos y absolutamente todos ellos han arrojado como resultado una violación de las desigualdades de Bell. Esto implica un triunfo para la teoría cuántica, que hasta ahora ha demostrado un grado altísimo de precisión en la descripción del mundo subatómico, incluso a pesar de sus consabidas predicciones reñidas con el sentido común y la experiencia cotidiana.

En la actualidad, se han realizado numerosos experimentos basados en esta paradoja y popularizados en ocasiones bajo el nombre de teletransporte cuántico. Este nombre llama a engaño, ya que el efecto producido no es un teletransporte de partículas al estilo de la ciencia ficción sino la transmisión de información del estado cuántico entre partículas entrelazadas. La comprensión de esta paradoja ha permitido profundizar en la interpretación de algunos de los aspectos menos intuitivos de la mecánica cuántica. Esta área continúa en desarrollo con la planificación y ejecución de nuevos experimentos.

Cuestionario:

1.- ¿Qué significa Valores Esperados?

2.- ¿En qué consiste la Interpretación de Copenhague?

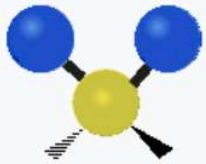
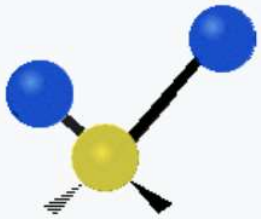
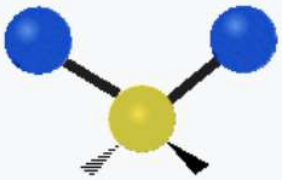
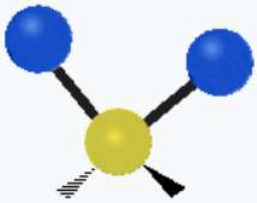
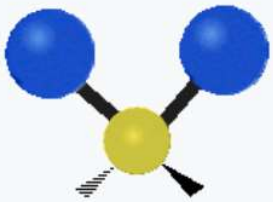
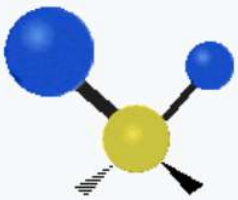
3.- ¿Que es la Mecánica cuántica?

4.- Explica detalladamente qué dice la paradoja de Einstein-Podolsky-Rosen?

5.- ¿Qué son los números cuánticos?

Debate 36. Modelo de Bohr. Espectros Atómicos

- Líneas espectrales
  http://cas.sdss.org/dr6/sp/proj/advanced/spectraltypes/energylevels.asp

Simetría / Dirección	Simétrico	Antisimétrico
Radial	 estiramiento simétrico (Symmetric stretching)	 estiramiento antisimétrico (Antisymmetric stretching)
Latitudinal	 flexión de tijera (Scissoring)	 flexión de balanceo (Rocking)
Longitudal	 flexión de aleteo (Wagging)	 flexión de torsión (Twisting)

Revisar estos videos

- Espectros Atómicos 20:13 https://www.youtube.com/watch?v=tR5XrdXv20c&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=18
- Modelos de Bohr 32;07 https://www.youtube.com/watch?v=9GnTFBDkLds&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=19

- Cálculo de radio y energía de primera órbita 5:33
  https://www.youtube.com/watch?v=WxaOvSMc6JA&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=20

- Transición electrónica 5:47
  https://www.youtube.com/watch?v=tHFcA1h1bEc&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=21

- Transiciones electrónicas 2 7:07
  https://www.youtube.com/watch?v=XC8Rd_BX-n8&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=22

- Series espectroscópicas 10:26
  https://www.youtube.com/watch?v=zW-hn5AnrSg&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=23

- Transición electrónica en átomo de hidrógeno. 5;21
  https://www.youtube.com/watch?v=sY7g-GM3Jig&list=PL0bLcQvcbD70zwfxAF636tUlHtLOPKlAv&index=24

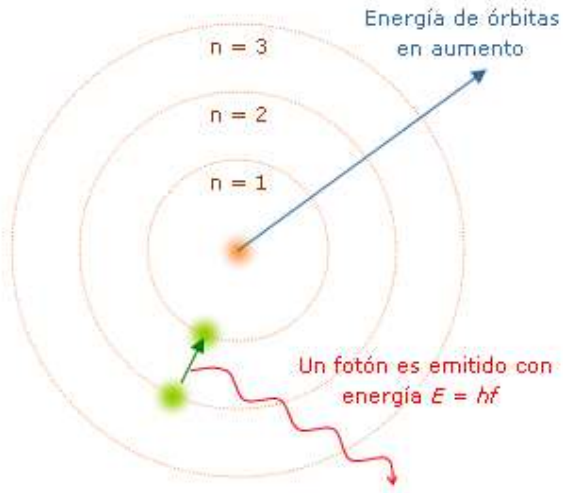


Diagrama del modelo atómico de Bohr.

El modelo atómico de Bohr es un modelo clásico del átomo, pero fue el primer modelo atómico en el que se introduce una cuantización a partir de ciertos

postulados. Dado que la cuantización del momento es introducida en forma adecuada (ad hoc), el modelo puede considerarse transaccional en cuanto a que se ubica entre la mecánica clásica y la cuántica. Fue propuesto en 1913 por el físico danés Niels Bohr, para explicar cómo los electrones pueden tener órbitas estables alrededor del núcleo y por qué los átomos presentaban espectros de emisión característicos (dos problemas que eran ignorados en el modelo previo de Rutherford). Además el modelo de Bohr incorporaba ideas tomadas del efecto fotoeléctrico, explicado por Albert Einstein.

Introducción

Bohr intentaba hacer un modelo atómico capaz de explicar la estabilidad de la materia y los espectros de emisión y absorción discretos que se observan en los gases. Describió el átomo de hidrógeno con un protón en el núcleo, y girando a su alrededor un electrón. El modelo atómico de Bohr partía conceptualmente del modelo atómico de Rutherford y de las incipientes ideas sobre cuantización que habían surgido unos años antes con las investigaciones de Max Planck y Albert Einstein.

En este modelo los electrones giran en órbitas circulares alrededor del núcleo, ocupando la órbita de menor energía posible, o la órbita más cercana posible al núcleo. El electromagnetismo clásico predecía que una partícula cargada moviéndose de forma circular emitiría energía por lo que los electrones deberían colapsar sobre el núcleo en breves instantes de tiempo. Para superar este problema Bohr supuso que los electrones solamente se podían mover en órbitas específicas, cada una de las cuales caracterizada por su nivel energético. Cada órbita puede entonces identificarse mediante un número entero n que toma valores desde 1 en adelante. Este número "n" recibe el nombre de número cuántico principal.

Bohr supuso además que el momento angular de cada electrón estaba cuantizado y solo podía variar en fracciones enteras de la constante de Planck. De acuerdo al número cuántico principal calculó las distancias a las cuales se hallaba del núcleo cada una de las órbitas permitidas en el átomo de hidrógeno. Estos niveles en un principio estaban clasificados por letras que empezaban en la "K" y terminaban en la "Q". Posteriormente los niveles electrónicos se ordenaron por números. Cada órbita tiene electrones con distintos niveles de energía obtenida que después se tiene que liberar y por esa razón el electrón va saltando de una órbita a otra hasta llegar a una que tenga el espacio y nivel adecuado, dependiendo de la energía que posea, para liberarse sin problema y de nuevo volver a su órbita de origen. Sin embargo no explicaba el espectro de estructura fina que podría ser explicado algunos años más tarde gracias al modelo atómico de Sommerfeld. Históricamente el desarrollo del modelo atómico de Bohr junto con la dualidad onda-corpúsculo permitiría a Erwin Schrödinger descubrir la ecuación fundamental de la mecánica cuántica.

Postulados de Bohr

En 1913, Niels Bohr desarrolló su célebre modelo atómico de acuerdo a tres postulados fundamentales

Primer postulado

Los electrones describen órbitas circulares en torno al núcleo del átomo sin irradiar energía.

La causa de que el electrón no irradie energía en su órbita es, de momento, un postulado, ya que según la electrodinámica clásica una carga con un movimiento acelerado debe emitir energía en forma de radiación.

Para mantener la órbita circular, la fuerza que experimenta el electrón —la fuerza coulombiana por la presencia del núcleo— debe ser igual a la fuerza centrípeta. Esto nos da la siguiente expresión:

$$k\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

Donde el primer término es la fuerza eléctrica o de Coulomb, y el segundo es la fuerza centrípeta; k es la constante de la fuerza de Coulomb, Z es el número atómico del átomo, ees la carga del electrón, es la masa del electrón, v es la velocidad del electrón en la órbita y r el radio de la órbita.

En la expresión anterior podemos despejar el radio, obteniendo:

$$r = k\frac{Ze^2}{m_e v^2}$$

Y ahora, con esta ecuación, y sabiendo que la energía total es la suma de las energías cinética y potencial:

$$E = T + V = \frac{1}{2}m_e v^2 - k\frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2}\frac{kZe^2}{r}$$

Donde queda expresada la energía de una órbita circular para el electrón en función del radio de dicha órbita.

Nota: a veces puede verse escrita en términos de la permitividad del vacío $k = 1/4\pi\epsilon_0$, o en unidades electroestáticas de carga: k=1.

Segundo postulado

Las únicas órbitas permitidas para un electrón son aquellas para las cuales el momento angular, L, del electrón sea un múltiplo entero de $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Esta condición matemáticamente se escribe:

$$L = m_e v r = n\hbar$$

con $n = 1, 2, 3, \ldots$

A partir de esta condición y de la expresión para el radio obtenida antes, podemos sustituir v y queda la condición de cuantización para los radios permitidos:

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{k m_e Z e^2}$$

con $n = 1, 2, 3, \cdots$; subíndice introducido en esta expresión para resaltar que el radio ahora es una magnitud discreta, a diferencia de lo que decía el primer postulado.

Ahora, dándole valores a n, numero cuántico principal,, obtenemos los radios de las órbitas permitidas. Al primero de ellos (con n=1), se le llama radio de Bohr :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{k m_e e^2} = 0.529$$

expresando el resultado en angstroms .

Del mismo modo podemos ahora sustituir los radios permitidos r_{n} en la expresión para la energía de la órbita y obtener así la energía correspondiente a cada nivel permitido:

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{k^2 m_e Z^2 e^4}{n^2\hbar^2}$$

Igual que antes, para el átomo de Hidrógeno (Z=1) y el primer nivel permitido (n=1), obtenemos:

$$E_0 = -\frac{1}{2}\frac{k^2 m_e e^4}{\hbar^2} = -13.6\ \mathrm{eV}$$

que es la llamada energía del estado fundamental del átomo de Hidrógeno. Y podemos expresar el resto de energías para cualquier Z y n como:

$$E_n = \frac{Z^2}{n^2} E_0$$

Este postulado, sin embargo, es incompatible con la mecánica cuántica moderna porque (1) presupone que v y r (y el momento cinético) adquieren valores bien definidos, en contradicción con el principio de incertidumbre, y (2) atribuye al primer nivel un valor no nulo del momento cinético.

Tercer postulado

El electrón solo emite o absorbe energía en los saltos de una órbita permitida a otra. En dicho cambio emite o absorbe un fotón cuya energía es la diferencia de energía entre ambos niveles. Este fotón, según la ley de Planck tiene una energía:

$$E_\gamma = h\nu = E_{n_f} - E_{n_i}$$

donde n_i identifica la órbita inicial y n_f la final, y v es la frecuencia.

Entonces las frecuencias de los fotones emitidos o absorbidos en la transición serán:

$$\nu = \frac{k^2 m_e Z^2 e^4}{2h\hbar^2}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right)$$

Esta última expresión fue muy bien recibida porque explicaba teóricamente la fórmula fenomenológica hallada antes por Balmer para describir las líneas espectrales observadas desde finales del siglo XIX en la desexcitación del Hidrógeno, que venían dadas por:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

con n=3,4,5,..., y donde R_H es la Constante de Rydberg para el hidrógeno. Y como vemos, la expresión teórica para el caso $n_f = 2$, es la expresión predicha por Balmer, y el valor medido experimentalmente de la constante de Rydberg ($1.09710^7 m^{-1}$), coincide con el valor de la fórmula teórica.

Se puede demostrar que este conjunto de hipótesis corresponde a la hipótesis de que los electrones estables orbitando un átomo están descritos por funciones de onda estacionarias. Un modelo atómico es una representación que describe las partes que tiene un átomo y como están dispuestas para formar un todo. Basándose en la constante de Planck E=hv consiguió cuantizar las órbitas observando las líneas del espectro.

Modelo atómico de Schrödinger

Densidad de probabilidad de ubicación de un electrón para los primeros niveles de energía.

El modelo atómico de Schrödinger (1926) es un modelo cuántico no relativista. En este modelo los electrones se contemplaban originalmente como una onda estacionaria de materia cuya amplitud decaía rápidamente al sobrepasar el radio atómico.

El modelo de Bohr funcionaba para el átomo de hidrógeno. En los espectros realizados para otros átomos se observaba que electrones de un mismo nivel energético tenían energías ligeramente diferentes. Esto no tenía explicación en el

modelo de Bohr, y sugería que se necesitaba alguna corrección. La propuesta fue que dentro de un mismo nivel energético existían subniveles. La forma concreta en que surgieron de manera natural estos subniveles, fue incorporando órbitas elípticas y correcciones relativistas. Así, en 1916, Arnold Sommerfeld modificó el modelo atómico de Bohr, en el cual los electrones solo giraban en órbitas circulares, al decir que también podían girar en órbitas elípticas más complejas y calculó los efectos relativistas.

Características del modelo

El modelo atómico de Schrödinger concebía originalmente los electrones como ondas de materia. Así la ecuación se integraría como la ecuación ondulatoria que describía la evolución en el tiempo y el espacio de dicha onda material. Más tarde Max Born propuso una interpretación probabilística de la difunción de onda de los electrones. Esa nueva interpretación es compatible con los electrones concebidos como partículas cuasipuntuales cuya probabilidad de presencia en una determinada región viene dada por la integral del cuadrado de la función de onda en una región. Es decir, en la interpretación posterior del modelo, este era un modelo probabilista que permitía hacer predicciones empíricas, pero en el que la posición y la cantidad de movimiento no pueden conocerse simultáneamente, por el principio de incertidumbre. Así mismo el resultado de ciertas mediciones no están determinadas por el modelo, sino solo el conjunto de resultados posibles y su distribución de probabilidad.

Adecuación empírica

El modelo atómico de Schrödinger predice adecuadamente las líneas de emisión espectrales, tanto de átomos neutros como de átomos ionizados. El modelo también predice la modificación de los niveles energéticos cuando existe un campo magnético o eléctrico (efecto Zeeman y efecto Stark respectivamente). Además, con ciertas modificaciones semiheurísticas el modelo explica el enlace químico y la estabilidad de las moléculas. Cuando se necesita una alta precisión en los niveles energéticos puede emplearse un modelo similar al de Schrödinger, pero donde el electrón es descrito mediante la ecuación relativista de Dirac en lugar de mediante la ecuación de Schrödinger. En el modelo de Dirac, se toma en cuenta la contribución del espín del electrón.

Solución de la ecuación de Schrödinger

Las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger en un campo central electrostático, están caracterizadas por tres números cuánticos (n, l, m) que a su vez están relacionados con lo que en el caso clásico corresponderían a las tres integrales del movimiento independientes de una partícula en un campo central. Estas soluciones o funciones de onda normalizadas vienen dadas en coordenadas esféricas por:

$$\psi_{nlm}(\theta,\phi,r) = \langle \vec{r}|nlm\rangle = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]}} 2e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left[\frac{2r}{na_0}\right] Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

donde:
a_0 es el radio de Bohr.
$L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$son los polinomios generalizados de Laguerre de grado n-l-1.
$Y_{l,m}(\theta,\phi)$ es el armónico esférico (l, m).
Los autovalores son:

Para el operador momento angular :
$L^2|n,l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|n,l,m\rangle$
$L_z|n,l,m\rangle = \hbar m|n,l,m\rangle$
Para el operador hamiltoniano:
$H|n,l,m\rangle = E_n|n,l,m\rangle$
donde:
$$E_n = -\frac{mc^2 Z^2 \alpha^2}{2\cdot n^2} = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{n^2}$$
α es la constante de estructura fina con Z=1.

Insuficiencias del modelo

Si bien el modelo de Schrödinger describe adecuadamente la estructura electrónica de los átomos, resulta incompleto en otros aspectos:

El modelo de Schrödinger en su formulación original no tiene en cuenta el espín de los electrones, esta deficiencia es corregida por el modelo de Schrödinger-Pauli.

El modelo de Schrödinger ignora los efectos relativistas de los electrones rápidos, esta deficiencia es corregida por la ecuación de Dirac que además incorpora la descripción del espín electrónico.

El modelo de Schrödinger si bien predice razonablemente bien los niveles energéticos, por sí mismo no explica por qué un electrón en un estado cuántico excitado decae hacia un nivel inferior si existe alguno libre. Esto fue explicado por primera vez por la electrodinámica cuántica y es un efecto de la energía del punto cero del vacío cuántico. Cuando se considera un átomo de hidrógeno los dos primeros aspectos pueden corregirse añadiendo términos correctivos al hamiltoniano atómico.

Ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac es una ecuación de ondas relativista de la mecánica cuántica formulada por Paul Dirac en 1928. Da una descripción de las partículas elementales con masa de espín 1/2, como el electrón, y es completamente consistente con los principios de la mecánica cuántica y de la teoría de la relatividad especial. Así mismo, explica de forma natural la existencia del espín y de las antipartículas.

Forma de la ecuación

Ya que la ecuación de Dirac fue originalmente formulada para describir el electrón, las referencias se harán respecto a electrones, aunque actualmente la ecuación se aplica a otros tipos de partículas elementales de espín ½, como los quarks. Una ecuación modificada de Dirac puede emplearse para describir de forma aproximada los protones y los neutrones, formados ambos por partículas más pequeñas llamadas quarks (por este hecho, a protones y neutrones no se les da la consideración de partículas elementales).

La ecuación de Dirac presenta la siguiente forma:

$$\left(\alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^{3} \alpha_j p_j \, c\right) \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t)$$

siendo m la masa en reposo del electrón, c la velocidad de la luz, p el operador de momento, la constante reducida de Planck, x y t las coordenadas del espacio y el tiempo, respectivamente; y ψ (x, t) una función de onda de cuatro componentes. La función de onda ha de ser formulada como un espinor (objeto matemático similar a un vector que cambia de signo con una rotación de 2π descubierto por Pauli y Dirac) de cuatro componentes, y no como un simple escalar, debido a los requerimientos de la relatividad especial. Los α son operadores lineales que gobiernan la función de onda, escritos como una matriz y son matrices de 4×4 conocidas como matrices de Dirac. Hay más de una forma de escoger un conjunto de matrices de Dirac; un criterio práctico es:

$$\alpha_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La ecuación de Dirac describe las amplitudes de probabilidad para un electrón solo. Esta teoría de una sola partícula da una predicción suficientemente buena del espín y del momento magnético del electrón, y explica la mayor parte de la estructura fina observada en las líneas espectrales atómicas. También realiza una peculiar predicción de que existe un conjunto infinito de estados cuánticos en que el electrón tiene energía negativa. Este extraño resultado permite a Dirac predecir, por medio

de las hipótesis contenidas en la llamada teoría de los agujeros, la existencia de electrones cargados positivamente. Esta predicción fue verificada con el descubrimiento del positrón, el año 1932.

A pesar de este éxito, la teoría fue descartada porque implicaba la creación y destrucción de partículas, enfrentándose así a una de las consecuencias básicas de la relatividad. Esta dificultad fue resuelta mediante su reformulación como una teoría cuántica de campos. Añadir un campo electromagnético cuantizado en esta teoría conduce a la moderna teoría de la electrodinámica cuántica (Quantum Electrodynamics, QED).

Deducción de la ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac es una extensión al caso relativista de la ecuación de Schrödinger, que describe la evolución en el tiempo de un sistema cuántico:

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

Por conveniencia, se trabajará en la base de posiciones, en que el estado del sistema es representado por la función de onda ψ(x,t). En esta base, la ecuación de Schrödinger se formula de la siguiente manera:

$$\hat{\mathbf{H}}\psi(\mathbf{x},t) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(\mathbf{x},t)$$

donde el hamiltoniano H denota un operador que actúa sobre una función de onda, y no sobre vectores de estado.

Debe especificarse el hamiltoniano de forma que describa adecuadamente la energía total del sistema en cuestión. Sea un electrón libre aislado de campos de fuerza externos. En un modelo no relativista, se adopta un hamiltoniano análogo a la energía cinética de la mecánica clásica (de momento ignorando el espín):

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_{j=1}^{3}\frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m}$$

siendo p los operadores de momento en cada dirección del espacio j = 1, 2, 3. Cada operador de momento actúa sobre la función de onda como una derivada espacial:

$$\hat{\mathbf{p}}_j\psi(\mathbf{x},t) \equiv -i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial x_j}(\mathbf{x},t)$$

Para describir un sistema relativista, debe encontrarse un hamiltoniano diferente. Se asume que los operadores de momento conservan la definición anterior. De acuerdo con la famosa relación masa-momento-energía de Albert Einstein, la energía total de un sistema viene dada por la expresión:

$$E = \sqrt{(mc^2)^2 + \sum_{j=1}^{3} (p_j c)^2}$$

de la cual se deduce que

$$\sqrt{(mc^2)^2 + \sum_{j=1}^{3} (p_j c)^2}\ \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Esta no es una ecuación satisfactoria, porque no trata por igual el espacio y el tiempo, uno de los principios básicos de la relatividad especial (el cuadrado de esta ecuación lleva a la ecuación de Klein-Gordon). Dirac razonó que, mientras la parte derecha de la ecuación contenía una derivada de primer orden respecto al tiempo, la parte de la izquierda debía contener igualmente una primera derivada respecto al espacio (i. e., los operadores de momento). Una posibilidad para obtener esta situación es que la cantidad de la raíz cuadrada sea un cuadrado perfecto. Considerando

$$(mc^2)^2 + \sum_{j=1}^{3} (p_j c)^2 = \left(\alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^{3} \alpha_j p_j\, c \right)^2$$

donde las α son constantes que deben ser determinadas. Elevando al cuadrado, y comparando coeficientes de cada término, se obtienen las siguientes condiciones por α:

$$\alpha_\mu^2 = I\,, \qquad \mu = 0, 1, 2, 3$$

$$\alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu = 0\,, \quad \mu \neq \nu$$

Aquí, I es el elemento identidad. Estas condiciones pueden sintetizarse en:

$$\{\alpha_\mu, \alpha_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu} \cdot I$$

donde {…} es el anticonmutador, definido como {A,B} ≡ AB+BA, y δ es la delta de Kronecker, que tiene valor 1 si los dos subíndices son iguales, y 0 en otro caso.

Estas condiciones pueden no ser satisfechas si los α son números ordinarios, pero sí se cumplen si las α son determinadas matrices. Las matrices deben ser hermíticas, ya que el hamiltoniano es un operador hermítico. Las matrices más pequeñas que funcionan son las 4×4, pero hay más de una elección posible, o representación, de las matrices. Si bien la elección de la representación no puede afectar a las propiedades de la ecuación de Dirac, afecta al significado físico de las componentes individuales de la función de onda.

Anteriormente se ha presentado la representación usada por Dirac. Una forma más compacta de describir esa representación es la siguiente:

$$\alpha_0 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} \quad \alpha_j = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{bmatrix}$$

donde 0 e I son las matrices 2×2 cero (nula) e identidad, respectivamente; y σj's (j=1, 2, 3) son las matrices de Pauli.

Ahora es sencillo operar la raíz cuadrada, de la que se obtiene la ecuación de Dirac. El hamiltoniano de esta ecuación

$$H = \alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^{3} \alpha_j p_j \, c$$

se denomina hamiltoniano de Dirac.

Naturaleza de la función de onda

Como la función de onda ψ se representa por la matriz de Dirac 4×1, ha de ser un objeto de 4 componentes. Se verá en la próxima sección que la función de onda contiene dos conjuntos de grados de libertad, uno asociado a la energía positiva y otro a la negativa. Cada conjunto contiene dos grados de libertad que describen las amplitudes de probabilidad de que el espín sea hacia arriba o hacia abajo, según una dirección especificada.

Se puede escribir explícitamente la función de onda como una matriz columna:

$$\psi(\mathbf{x}, t) \equiv \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{x}, t) \\ \psi_2(\mathbf{x}, t) \\ \psi_3(\mathbf{x}, t) \\ \psi_4(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix}$$

La ecuación de la onda dual puede ser escrita como una matriz simple:

$$\psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \equiv \begin{bmatrix} \psi_1^*(\mathbf{x}, t) & \psi_2^*(\mathbf{x}, t) & \psi_3^*(\mathbf{x}, t) & \psi_4^*(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix}$$

donde el superíndice denota una conjugación compleja. La dualidad de una función de onda escalar (un componente) es un conjugado complejo.

Como en la mecánica cuántica de una partícula única, el cuadrado absoluto de la función de onda da la densidad de probabilidad de la partícula en cada posición x, tiempo t. En este caso, el cuadrado absoluto es obtenido por multiplicación de matrices:

$$\psi^\dagger \psi \, (\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{4} \psi_j^*(\mathbf{x}, t) \psi_j(\mathbf{x}, t)$$

La conservación de la probabilidad da la condición de normalización

$$\int \psi^\dagger \psi \left(\mathbf{x}, t\right) \, d^3x = 1$$

Aplicando la ecuación de Dirac, podemos examinar el flujo local de probabilidad:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \psi \left(\mathbf{x}, t\right) = -\nabla \cdot \mathbf{J}$$

El flujo de probabilidad J viene dado por

$$J_j = c\psi^\dagger \alpha_j \psi$$

Multiplicando J por la carga del electrón e se obtiene la densidad de corriente eléctrica j llevada por el electrón.

Los valores de las componentes de la función de onda dependen del sistema de coordenadas. Dirac mostró cómo ψ se transforma bajo cambios generales del sistema coordenado, incluyendo rotaciones en el espacio tridimensional, así como en las transformaciones de Lorentz entre los esquemas relativistas de referencia. Esto lleva a que ψ no se transforma como un vector, debido a rotaciones; y de hecho es un tipo de objeto conocido como espinor.

Espectro de energía

Es instructivo hallar los estados propios de energía del Hamiltoniano de Dirac. Para ello, se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$H\psi_0(\mathbf{x}) = E\psi_0(\mathbf{x})$$

donde ψ es el fragmento independiente del tiempo de la autofunción (eigenfunction) de la energía:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar}$$

Buscamos una solución de onda plana. Por conveniencia, se toma la z del eje como la dirección en que la partícula se está moviendo, como

$$\psi_0 = we^{\frac{ipz}{\hbar}}$$

donde w es un espinor constante de cuatro componentes, y p es el momento de la partícula, tal y como podemos verificar aplicando el operador de momento a la función de onda. En la representación de Dirac, la ecuación por ψ0 disminuye en la ecuación de valores propios.

$$\begin{bmatrix} mc^2 & 0 & pc & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & -pc \\ pc & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & -pc & 0 & -mc^2 \end{bmatrix} w = Ew$$

Para cada valor de p, hay dos espacios propios, ambos de dos dimensiones. Un espacio propio contiene valores propios positivos, y el otro valores propios negativos, de la forma:

$$E_{\pm}(p) = \pm\sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2}$$

El espacio propio positivo está estructurado por los estados propios:

$$\frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + (pc)^2}} \left\{ \begin{bmatrix} pc \\ 0 \\ \epsilon \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ pc \\ 0 \\ -\epsilon \end{bmatrix} \right\}$$

y el espacio propio negativo por los estados propios:

$$\frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + (pc)^2}} \left\{ \begin{bmatrix} -\epsilon \\ 0 \\ pc \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ \epsilon \\ 0 \\ pc \end{bmatrix} \right\}$$

Donde

$$\epsilon \equiv |E| - mc^2$$

El primer estado propio de la estructura de cada espacio propio tiene espín apuntando en la dirección +z (espín hacia arriba) y el segundo espín propio tiene espín apuntando en la dirección -z (espín hacia abajo).

En el límite no relativista, la componente del espinor ε reduce la energía cinética de la partícula, que es insignificante comparada con pc:

$$\epsilon \sim \frac{p^2}{2m} \ll pc$$

En este límite, por tanto, podemos interpretar los cuatro componentes de la función de onda como sus amplitudes respectivas del (I) espín hacia arriba con energía positiva, y el (II) espín hacia abajo con energía positiva, (III) espín hacia arriba con energía negativa, y (IV) espín abajo con energía negativa. Esta descripción no es muy exacta en el régimen de la relatividad, donde los componentes no nulos del espinor son de medidas similares.

Teoría de huecos

Las soluciones negativas de E en la sección precedente son problemáticas: desde el punto de vista de la mecánica relativista, la energía de una partícula en reposo (p = 0) sería E = mc2 tanto como E = - mc2. Matemáticamente parece no haber motivo alguno para rechazar las soluciones correspondientes a energía negativa.

Para afrontar este problema, Dirac introdujo una hipótesis (conocida como teoría de huecos) según la cual el vacío es el estado más importante de los cuantos, en el que todos los estados propios de energía negativa del electrón están ocupados. Esta descripción del vacío, como un «mar» de electrones es llamada el mar de

Dirac. El principio de exclusión de Pauli prohíbe a los electrones ocupar el mismo estado, cualquier electrón adicional sería forzado a ocupar un estado propio de energía positiva, y los electrones de energía positiva no podrían decaer a estados propios de energía negativa.

Posteriormente Dirac razonó que si los estados propios de energía negativa están llenos de forma incompleta, cada estado propio no ocupado —llamado hueco— podría comportarse como una partícula cargada positivamente. El hueco tiene energía positiva, ya que se necesita energía para crear un par partícula-hueco a partir del vacío. Dirac en un principio pensaba que el hueco era un protón, pero Hermann Weyl advirtió de que el hueco se comportaría como si tuviera la misma masa del electrón, mientras que el protón es, aproximadamente, dos mil veces más masivo. El hueco fue finalmente identificado como positrón, partícula descubierta experimentalmente por Carl David Anderson en 1932.

Por necesidad, la teoría de huecos asume que los electrones de energía negativa en el mar de Dirac no interaccionan unos con otros, ni con los electrones de energía positiva. Con esta asunción, el mar de Dirac produciría una inmensa (de hecho, infinita) carga eléctrica negativa, la mayor parte de la cual de una forma u otra sería anulada por un mar de carga positiva debido a que el vacío permanece eléctricamente neutro. Sin embargo, es completamente insatisfactorio postular que los electrones de energía positiva pueden ser afectados por el campo electromagnético, mientras los electrones de energía negativa no lo son. Por este motivo, los físicos abandonaron la teoría de huecos en favor de la teoría de campos de Dirac, que deja de lado el problema de los estados de energía negativa tratando los positrones como verdaderas partículas. (Caveat: en algunas aplicaciones de la física de la materia condensada, los conceptos basados en la «teoría de huecos» son válidos). El mar de electrones de conducción, en un conductor eléctrico, llamado mar de Fermi, contiene electrones con energías más altas que el potencial químico del sistema. Un estado vacío en el mar de Fermi se comporta como un electrón cargado positivamente, si bien se remite tanto a un «hueco» como a un positrón. La carga negativa del mar de Fermi es equilibrada por la carga positiva de la reja iónica del material.

En el enfoque moderno la interpretación del mar de electrones se refiere al problema de la elección del estado del vacío. De hecho en algunas teorías, diferentes elecciones del estado del vacío pueden tener consecuencias físicas diferentes.

Interacción electromagnética

Hasta aquí se ha considerado un electrón que no está en contacto con campos externos. Continuando por analogía con el hamiltoniano de una partícula cargada en la electrodinámica cuántica, se puede modificar el hamiltoniano de Dirac para incluir

los efectos de un campo electromagnético. El hamiltoniano revisado es (en unidades del Sistema Internacional):

$$H = \alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^{3} \alpha_j \left[p_j - \frac{e}{c} A_j(\mathbf{x}, t) \right] c + e\phi(\mathbf{x}, t)$$

donde e es la carga eléctrica del electrón y A y Φ son los potenciales electromagnéticos vectorial y escalar, respectivamente. Aquí, los potenciales se escriben como funciones del tiempo t y del operador de posición x. Esta es una aproximación semiclásica que es válida cuando las fluctuaciones cuánticas del campo (por ejemplo, la emisión y absorción de fotones) no son importantes.

Dando a Φ el valor 0 y trabajando en el límite no relativista, Dirac solucionó para las dos primeras componentes en las funciones de onda de energía positiva (que son las componentes dominantes en el límite no relativista), obteniendo

$$\left(\frac{1}{2m} \sum_j |p_j - eA_j(\mathbf{x}, t)|^2 - \frac{\hbar e}{2mc} \sum_j \sigma_j B_j(\mathbf{x}) \right) \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}$$

$$= (E - mc^2) \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}$$

donde $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ es el campo magnético que actúa sobre la partícula. Esta es precisamente la ecuación de Pauli para una partícula de espín ½ no relativista, con un momento magnético $\hbar e/2mc$ (por ejemplo: un factor g de espín igual a 2). El momento magnético real del electrón es mayor que eso, pero únicamente un 0,12% mayor. La diferencia se debe a las fluctuaciones cuánticas en el campo electromagnético, que pueden ser menospreciadas.

Años después del descubrimiento de la ecuación de Dirac, la mayoría de físicos creían que también describía el protón y el neutrón, que también son partículas de espín -1/2. Sin embargo, desde los experimentos de Stern y Frisch en 1933, se descubrió que el momento magnético de estas partículas era notablemente diferente de las predicciones de la ecuación de Dirac. El protón tiene un momento magnético 2,79 veces mayor que la predicción (con la masa del protón puesta como m en las fórmulas mencionadas), i.e., un factor g de 5,58. El neutrón, que es eléctricamente neutro, tiene un factor g de -3,83. Estos momentos magnéticos anormales fueron el primer indicio experimental de que el protón y el neutrón no eran partículas elementales. De hecho están compuestos de partículas más pequeñas llamadas quarks.

Interacción hamiltoniana

Es digno de tenerse en cuenta que el hamiltoniano puede ser escrito como suma de dos términos:

$$H = H_{el} + H_{int}$$

Donde Hel es el hamiltoniano de Dirac para un electrón libre y Hint es el hamiltoniano de la interacción electromagnética. Este último se puede escribir como:

$$H_{int} = e\phi(\mathbf{x},t) - ec\sum_{j=1}^{3}\alpha_j A_j(\mathbf{x},t)$$

Esto tiene el valor esperado

$$\langle H\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^\dagger H_{int}\psi \, d^3x = \int_{\mathbb{R}^3}\left(\rho\phi - \sum_{i=1}^{3} j_i A_i\right)\, d^3x$$

donde ρ es la densidad de carga eléctrica y j es la densidad de corriente eléctrica. La integral en el último término es la densidad de energía de interacción. Eso es una cantidad escalar covariante relativista, como puede observarse escribiéndolo en términos del cuadrivector carga-corriente j = (ρc, j) y el cuatrivector del potencial A = (φ/c, A):

$$\langle H\rangle = \int \left(\sum_{\nu=0}^{3} j^\nu A_\nu\right)\, d^3r$$

Átomo hidrogenoide relativista

La ecuación de Schrödinger aplicada a electrones es solo una aproximación no relativista a la ecuación de Dirac que da cuenta tanto del efecto del espín del electrón. En el tratamiento de Dirac de los electrones de hecho la función de onda debe substituirse por un espinor de cuatro componentes.

$$\psi^{(\pm)}_{n,jm}(r,\theta,\phi) = \begin{Bmatrix} \dfrac{iG_{n,lj}(r)}{r}\boldsymbol{\varphi}^{(\pm)}_{jm} \\ \dfrac{F_{n,lj}(r)}{r}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{r}})\boldsymbol{\varphi}^{(\pm)}_{jm} \end{Bmatrix}$$

Donde las funciones F y G se expresan en términos de funciones hipergeométricas:

$$F_{n,lj}(r) = \left(1+\frac{E}{mc^2}\right)e^{-\frac{\rho}{2}}(F_1(\rho)+F_2(\rho)), \qquad G_{n,lj}(r) = \left(1-\frac{E}{mc^2}\right)e^{-\frac{\rho}{2}}(F_1(\rho)-F_2(\rho)),$$

A modo de comparación con el caso no relativista se dan a continuación la forma explícita del espinor de funciones de onda del estado fundamental:

$$\psi_{n=1,j=\frac{1}{2},m=+\frac{1}{2}}(r,\theta,\phi) = \frac{(2mZ\alpha)^{3/2}}{(4\pi)^{1/2}}\left(\frac{1+\gamma}{2\Gamma(1+2\gamma)}\right)^{1/2}(2mZ\alpha r)^{\gamma-1}e^{-mZ\alpha r}\begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{i(1-\gamma)}{Z\alpha}\cos\theta \\ \dfrac{i(1-\gamma)}{Z\alpha}\sin\theta e^{i\varphi} \end{Bmatrix}$$

$$\psi_{n=1,j=\frac{1}{2},m=-\frac{1}{2}}(r,\theta,\phi) = \frac{(2mZ\alpha)^{3/2}}{(4\pi)^{1/2}}\left(\frac{1+\gamma}{2\Gamma(1+2\gamma)}\right)^{1/2}(2mZ\alpha r)^{\gamma-1}e^{-mZ\alpha r}\begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{i(1-\gamma)}{Z\alpha}\sin\theta e^{-i\varphi} \\ \frac{i(1-\gamma)}{Z\alpha}\cos\theta \end{Bmatrix}$$

El límite no relativista se obtiene haciendo tender $\gamma := \sqrt{1-Z^2\alpha^2} \to 1$, es decir, haciendo tender la constante de estructura fina a cero.

El tratamiento de los electrones mediante la ecuación de Dirac solo supone pequeñas correcciones a los niveles dados por la ecuación de Schrödinger. Tal vez el efecto más interesante es la desaparición de la degeneración de los niveles, por el efecto de la interacción espín-órbita consistente en que los electrones con valores diferentes del tercer número cuántico m (número cuántico magnético) tienen diferentes energía debido al efecto sobre ellos del momento magnético del núcleo atómico. De hecho los niveles energéticos vienen dados por:

$$E_n - m_e c^2 \approx \frac{m_e c^2}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n-|m|+\sqrt{m^2+(Z\alpha)^2}}\right)^2$$

Donde:
m_e es la masa del electrón.
c α son la velocidad de la luz y la constante de estructura fina.
Z, n, m son el número de protones del núcleo, el número cuántico principal y el número cuántico magnético.

Si se prescinde de la energía asociada a la masa en reposo del electrón estos niveles pueden resultan cercanos a los predichos por la ecuación de Schrödinger, especialmente en el caso m = 0:

$$E_n - m_e c^2 \approx \frac{m_e c^2}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n-|m|+\sqrt{m^2+(Z\alpha)^2}}\right)^2$$

Notación covariante relativista

Volvemos a la ecuación de Dirac para el electrón libre. A veces es conveniente escribir la ecuación en una forma covariante relativista, en la que las derivadas en el tiempo y el espacio se tratan al mismo nivel. Para hacer esto, debe tenerse en cuenta que el operador del momento p funciona como una derivada espacial:
$\mathbf{p}\psi(\mathbf{x},t) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{x},t)$

Multiplicando cada miembro de la ecuación de Dirac por α_0 (recordando que $\alpha_0^2 = I$) y sustituyendo en la mencionada definición de p, se obtiene

$$\left[i\hbar c\left(\alpha_0 \frac{\partial}{c\partial t} + \sum_{j=1}^{3} \alpha_0 \alpha_j \frac{\partial}{\partial x_j}\right) - mc^2\right]\psi = 0$$

Ahora, se definen cuatro matrices gamma:

$$\gamma_0 = \alpha_0\,, \quad \gamma^j = \alpha_0 \alpha_j$$

Estas matrices tienen la propiedad de que

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta_{\mu\nu} \cdot I\,, \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3$$

donde η, una vez más, es la métrica del espacio-tiempo plano. Estas relaciones definen un álgebra de Clifford denominada «álgebra de Dirac». La ecuación de Dirac puede ser ahora reformulada, usando el cuatrivector de posición-tiempo x = (ct, x), como

$$\left(i\hbar c \sum_{\mu=0}^{3} \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc^2\right)\psi = 0$$

O como

$$\frac{h}{2\pi} \sum_{\mu=0}^{3} \gamma^\mu\, \partial_\mu \psi + imc\psi = 0$$

La forma usual de la ecuación en teoría cuántica de campos y física de partículas, empleando el convenio de suma de Einstein y un sistema de unidades en el que h=1 y c=1 es

$$(i\ \partial\!\!\!/ - m)\psi \equiv (i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0$$

Modos de Vibracion

Simetría Dirección Simétrico Antisimétrico
Radial estiramiento simétrico (Symmetric stretching) estiramiento antisimétrico (Antisymmetric stretching)
Latitudinal flexión de tijera (Scissoring) flexión de balanceo (Rocking)
Longitudal flexión de aleteo (Wagging) flexión de torsión (Twisting)

Cuestionario:

1.- ¿Que establecen los postulados de Bohr?

2.- ¿Qué son los números cuánticos?

3.- ¿Que es la constante de Rydberg para el hidrógeno?

4.- ¿Que es el radio de Bohr?

5.- ¿Qué es un espectro de emisión y uno de absorción?

6.- ¿Que es la serie de Balmer?

7.- ¿Qué significa en física cuántica que sea "discreto"?

Debate 37. Líneas Espectrales

- Espectros de emisión y absorción de los elementos https://www.edumedia-sciences.com/es/media/661-espectro-de-emision-y-absorcion

Revisar los siguientes videos

- LYMAN, BALMER Y RYDBERG | Química Básica 10:52 https://www.youtube.com/watch?v=0NSbbMG6MY0

- Hibridación 7:57 https://www.youtube.com/watch?v=6da2hyd4vu0

- HIBRIDACIÓN SP2 | Química Básica 8:34 https://www.youtube.com/watch?v=siKcC-qfCRY&list=PLJ1OaZOKtc5ZYMf51CONrVskTP9xBZGEg

- NÚMEROS CUÁNTICOS Y ORBITALES 15:30 https://www.youtube.com/watch?v=qXBqAYKQU6Y&list=PLJ1OaZOKtc5bfrYG8eNWtR_98TrvWgIEV&index=15

LÍNEAS ESPECTRALES

Tipos de líneas espectrales

Espectro continuo

Líneas de absorción

Las líneas espectrales son el resultado de la interacción entre un sistema cuántico —por lo general, átomos, pero algunas veces moléculas o núcleos atómicos— y fotones. Cuando un fotón tiene una energía muy cercana a la necesaria para cambiar el estado de energía del sistema (en el caso del átomo el cambio de estado de energía sería un electrón cambiando de orbital), el fotón es absorbido. Tiempo después, será reemitido, ya sea en la misma frecuencia —o longitud de onda que originalmente tenía, o en forma de cascada, es decir, una serie de fotones de diferente frecuencia. La dirección en la que el nuevo fotón será reemitido estará relacionada con la dirección de donde provino el fotón original.

Dependiendo del tipo de gas, la fuente luminosa y lo que arribe al detector, se pueden producir dos tipos de líneas: de emisión o de absorción. Si el gas se encuentra entre el detector y la fuente de luz —la cual, por lo general, se tratará de una fuente con espectro continuo—, de tal forma que el detector pueda observar el espectro tanto del gas como de la fuente, se observará una disminución de la intensidad de la luz en la frecuencia del fotón incidente, debido a que la mayor parte de los fotones reemitidos saldrán en direcciones diferentes a las que poseían los fotones originales. En este caso se observará una línea de absorción. Por otro lado, si el detector es capaz de observar el gas, pero no puede ver la fuente de luz, se observarán solamente los fotones reemitidos, resultando en líneas de emisión.

La posición de las líneas espectrales depende del átomo o molécula que las produzca. Debido a lo anterior, estas líneas son de gran utilidad para identificar la composición química de cualquier medio que permita pasar la luz a través de él. Varios elementos químicos se han descubierto gracias a la espectroscopia. Entre algunos de estos están el helio, el talio y el cerio. Las líneas espectrales también dependen de las condiciones físicas del gas. Por esta razón, son comúnmente utilizadas para determinar las características físicas, además de la composición química, de estrellas y otros cuerpos celestes, para los cuales no existe ningún otro método de análisis.

Existen otros mecanismos de producción de líneas espectrales, además de las interacciones fotón-átomo. Dependiendo del tipo de interacción física (entre moléculas, átomos, etc.), la frecuencia de los fotones resultantes puede ser muy diversa. Debido a esto, se pueden observar líneas en cualquier región del espectro electromagnético, desde las ondas de radio hasta los rayos gamma.

Nomenclatura

Muchas líneas espectrales, las llamadas «líneas de Fraunhofer», poseen una nomenclatura especial. Por ejemplo la línea producida por el átomo de calcio una vez ionizado, a una longitud de onda de 430,774 nm, se conoce como la «línea K». A las líneas de átomos que no tienen una designación de Fraunhofer especial se les suele denotar por el símbolo del elemento químico en cuestión, seguido de un número romano. Para los átomos neutros se utiliza el número I. Si el átomo está ionizado una vez, se usa el número II, III para átomos ionizados dos veces y así sucesivamente. En muchos casos, debido a que un mismo átomo produce una serie de líneas, se suele añadir también la longitud de onda, por lo general en angstroms —en el caso del espectro en luz visible— u otras unidades (nanómetros, micras, etc.). Por ejemplo, para el caso de la línea del estroncio ionizado una vez, a 407,7 nm, se utiliza la nomenclatura «SrII λ4077».

Existen algunas líneas que solamente se pueden producir en gases cuya densidad es mucho menor a la que se podría tener en condiciones normales en la Tierra. Esta clase de líneas se conocen como líneas prohibidas. Para estas líneas se suele escribir el símbolo químico y el número romano entre corchetes. Por ejemplo, [OIII] λ 5007 es la línea prohibida del oxígeno ionizado dos veces, en 5007 Å.

Un caso especial son las líneas producidas por el átomo de hidrógeno neutro. En este caso se utilizan letras griegas para designarlas, antecedidas por otros símbolos, dependiendo de nivel energético hacia el cual el electrón desciende. Para cambios hacia primer nivel (serie de Lyman) desde el segundo se utiliza la nomenclatura «Lyα», del nivel 3 al 1 se utiliza la nomenclatura «Lyß», y así, sucesivamente. Para cambios hacia nivel 2 (serie de Balmer) desde el 3 se utiliza la nomenclatura «Hα»; del 4 al 2, «Hβ»; del 5 al 2, «Hγ»; etc. En el caso de cambios hacia el nivel 3 desde niveles superiores (serie de Paschen) se utilizan «Paα», «Paβ», «Paγ», etc. Hacia el nivel 4 desde niveles más altos (serie de Brackett), la designación es «Brα», «Brβ», «Brγ», etc. Para transiciones hacia niveles más altos, se utiliza el número del nivel más bajo. Por ejemplo, para un electrón que va del nivel 23 al nivel 22, se utilizaría «22α», del nivel 24 al 22, «22β», etc.

Desplazamiento y ensanchamiento de las líneas espectrales

Desplazamiento Doppler

Ocurre comúnmente que las líneas espectrales de objetos astronómicos se observen en longitudes de onda diferentes a la que teóricamente se producen. Este fenómeno, conocido como efecto Doppler, ocurre cuando el objeto se mueve acercándose al observador o alejándose de este. En el primer caso, la línea se observa en longitudes de onda menores a la teórica –se dice que el espectro se corre hacia el azul—. En el segundo caso, la línea se observa en longitudes de onda mayores a la teórica —es decir, el espectro se corre al rojo—. Este efecto depende de la velocidad que tenga el objeto con respecto al observador. La relación, cuando

la velocidad del objeto relativa al observador es mucho menor la velocidad de la luz en el vacío, está dada por la ecuación:

$$\nu_o = \left(1 - \frac{v}{c}\right) \nu_t$$

En donde $\nu_o$es la frecuencia observada,v es la velocidad del objeto relativa al observador, c es la velocidad de la luz en el vacío y vt es la frecuencia teórica. Puede notarse que si v=0, es decir, si el objeto no se mueve con respecto al observador, la línea se observará en la misma posición que debe tener teóricamente.

Ensanchamiento de líneas

Las líneas espectrales se extienden sobre un rango de frecuencias, en vez de una sola frecuencia (es decir tienen un ancho de línea diferente de cero). Existen varios factores que hacen que la línea se ensanche y cada uno de ellos le dará diferente forma a la misma. Estos factores pueden ser debidos a condiciones locales o a condiciones externas. Los primeros ocurren dentro del objeto emisor, usualmente dentro de una zona lo suficientemente pequeña como para que se pueda dar un equilibrio termodinámico local. Los segundos se tratan de cambios en la distribución espectral de la radiación al tiempo que esta atraviesa el medio que se pudiera encontrar entre el observador y el objeto. Puede darse el caso también de que las diferentes partes de un mismo objeto emitan radiación de forma diferente entre éstas (por ejemplo, en una galaxia lejana, debido a que está compuesta por estrellas de diferentes clases, además de medio interestelar, su espectro resultaría en una combinación del espectro de todos los objetos que la componen), resultando en una combinación de la radiación observada.

Ensanchamiento debido a efectos locales

Ensanchamiento natural

El principio de incertidumbre de Heisenberg para la energía y el tiempo establece que si existe una incertidumbre Δten el tiempo en que permanece un sistema en un estado de energía, entonces el sistema tiene una energía dentro de un rango ΔE, en vez de una energía específica, lo que se traduce en un rango de frecuencias en los fotones emitidos. Un electrón en un nivel de energía diferente del estado base tiende a permanecer un cierto tiempo en este nivel hasta que finalmente decae hacia un nivel de energía inferior. El tiempo exacto durante el cual permanece en ese estado no es el mismo en cada decaimiento; es aleatorio, por lo que no se puede calcular analíticamente. Sin embargo, por medio de estadística, se puede calcular un tiempo de vida promedio. Si se tiene un conjunto de átomos, cada uno de los cuales tiene un electrón en un mismo estado excitado, después de un tiempo $\boldsymbol{\tau}$, una fracción de los electrones habrán decaído a un nivel más bajo. Después de

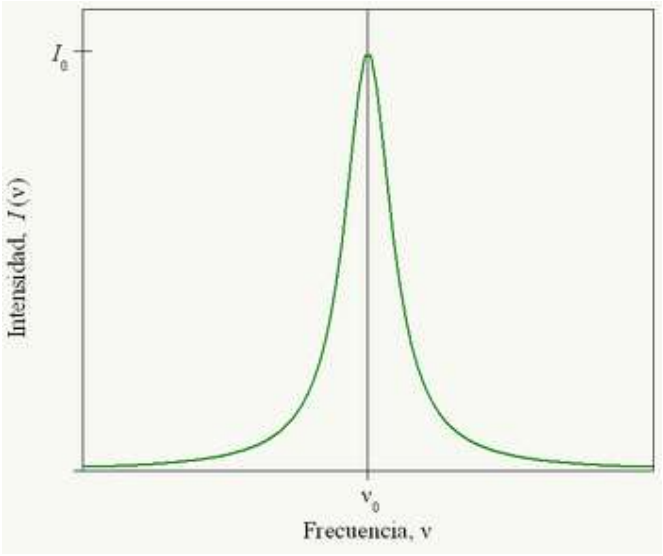
otro tiempo τ , de los electrones que quedaban en estado excitado, una fracción similar decaerá. Es decir, la población de electrones en estado excitado disminuirá de forma exponencial. Expresado en forma de ecuación, el número de electrones en el estado excitado a un tiempo t será:

$$n(t) = n(0)\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$

Donde n(t) es el número de electrones en estado excitado en un tiempo t y n(0) es el número de electrones en estado excitado que había en un principio. El flujo de radiación emitido por estos electrones también será una función exponencial decreciente:

$$L(t) = L(0)\exp(-\gamma t)$$

con γ una constante que nos indica la tasa de decaimiento del flujo.



Ensanchamiento natural de una línea de emisión. La línea adquiere un perfil lorentziano.

Sabiendo el flujo de radiación en función del tiempo, se puede calcular la intensidad de la radiación en función de su frecuencia a través de una transformada de Fourier, aplicada a la función de flujo. La función resultante es una función de Lorentz:

$$I(\nu) = I_0 \frac{(\gamma/4\pi)^2}{(\nu-\nu_0)^2 + (\gamma/4\pi)^2}$$

Donde I_0 es la máxima intensidad de radiación que alcanza la línea y ν_0 es la frecuencia central de la línea.

Típicamente, una línea espectral ensanchada de forma natural tiene un ancho a media altura en un rango entre 0,1 a 100 MHz, en términos de longitud de onda,

entre y nm. En su forma más sencilla, el ancho a media altura para el ensanchamiento natural se puede calcular a través de la siguiente expresión:

$$\delta\nu_L = \frac{e^2\nu_0^2}{3\epsilon_0 mc^3} = \frac{\gamma}{2\pi}$$

con , e la carga del electrón y ϵ_0 la permitividad eléctrica del vacío. Estos anchos son mucho menores a los que se encuentran normalmente en objetos astronómicos cuyas líneas espectrales han sido ensanchadas por otros factores. Sin embargo, el ensanchamiento natural puede ser importante en algunos casos, como por ejemplo en espectroscopia láser. Aun cuando otros tipos de ensanchamientos dominen al ensanchamiento natural, las alas de la distribución de Lorentz (es decir los lados que tienden a cero en la función), pueden contribuir a la radiación emitida o absorbida, ya que la función de Lorentz cae de una forma más lenta, comparada con otras funciones, por ejemplo, la exponencial.

Ensanchamiento Doppler térmico

En la teoría cinética de los gases, la temperatura de un gas es una consecuencia de la energía cinética de las partículas que lo conforman. La velocidad a la que las partículas se mueven depende de la temperatura que dicho gas tenga.10 Sin embargo, las partículas tendrán diferentes velocidades. Cuando el gas se encuentra en equilibrio termodinámico, el número de partículas que poseen una cierta velocidad se puede conocer haciendo uso de la estadística de Maxwell-Boltzmann. A partir de esta, se puede llegar a la distribución de Maxwell-Boltzmann, que nos relaciona la fracción f de átomos con un cierto intervalo infinitesimal de velocidades y la temperatura del gas:

$$f(v_x, T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}}\exp\left(-\frac{mv_x^2}{2kT}\right)$$

En esta ecuación, v_x es la velocidad de las partículas en la dirección del observador, m es la masa de las partículas, T es la temperatura del gas y k es la constante de Boltzmann.

Ensanchamiento de una línea de emisión por efecto Doppler. El perfil de la línea es una función de Gauss , la cual decae más rápidamente que una función de Lorentz.

Al igual que en el caso del desplazamiento Doppler, una partícula que se acerca o se aleja del observador emitirá una línea espectral con menor o mayor longitud de onda, respectivamente, a la predicha por la teoría. Debido a que el desplazamiento Doppler depende directamente de la velocidad, las partículas del gas emitirán líneas espectrales siguiendo una distribución de longitudes de onda similar a la distribución de Maxwell-Boltzmann. Esta última es una distribución Gaussiana. Usando un poco de álgebra, se puede pasar de la fracción de átomos con cierta velocidad a una intensidad de luz y, por medio de la ecuación para el efecto Doppler, el argumento

del exponencial se puede escribir en términos de la frecuencia. La forma final de la línea ensanchada por efecto Doppler térmico será:

$$I = I_0 \exp\left[-\frac{mc^2}{2kT}\left(\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0}\right)^2\right]$$

Donde I es la intensidad e I_0 es la intensidad máxima de la línea. El ancho a media altura en este caso es:

$$\delta\nu_i = \frac{1}{2\pi\bar{t}}$$

Debido a que los anchos de las líneas dependen directamente de la temperatura del gas que lo produce, éstos pueden tomar un amplio rango de valores. En la mayoría de los casos estos anchos son mucho mayores a los producidos por el ensanchamiento natural. El perfil del ensanchamiento Doppler es mucho más redondeado que el del ensanchamiento natural. Por otro lado, las alas de la función exponencial decaen más rápidamente a cero que la función de Lorentz conforme cada una de éstas se alejan del centro. Esto provoca que, en algunos casos, el ensanchamiento natural tenga, en las zonas alejadas de la frecuencia central, una contribución a la intensidad más importante que el ensanchamiento Doppler.

Ensanchamiento por presión

En los fluidos, la presión es una consecuencia de las colisiones de las partículas que los conforman. Una superficie dentro de un fluido (por ejemplo, la pared del contenedor de un gas) recibe, en promedio, la misma cantidad de colisiones en un mismo período. Esto se traduce en una fuerza constante dentro de esa área, lo que da lugar a la presión. Cuanta mayor presión exista en un gas, mayor será el número de colisiones sobre un área determinada.

En lo que respecta a una partícula aislada, otras partículas dentro del gas al cual pertenece colisionarán con ella con una frecuencia mayor cuanto mayor sea la presión. Estas colisiones afectarán la forma de la radiación que emite la partícula de formas muy diversas, dependiendo del tipo de interacción que exista entre las partículas al momento del choque. Asimismo, existen muchas clases de interacciones que vuelven este problema muy complejo de tratar matemáticamente. Sin embargo, se pueden mencionar algunos casos sencillos que tienen gran relevancia experimental.

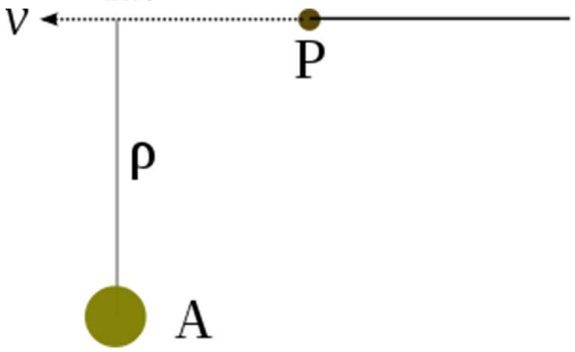
Ensanchamiento por presión de impacto. Cuando una partícula emisora es impactada por otra, la emisión de luz es interrumpida abruptamente. Las colisiones entre partículas son completamente aleatorias, pero, estadísticamente se espera un tiempo promedio entre colisión y colisión, que se denota por . Usando los mismos argumentos que en el caso del ensanchamiento natural, se puede obtener el

número de partículas que no han sufrido una colisión después de un tiempo , a partir de la siguiente fórmula:

$$N(t) = N(0)\exp\left(-\frac{t}{\bar{t}}\right)$$

Aquí, N(0) es el número de partículas sin recibir un impacto al tiempo t=0. La expresión anterior es similar a la expresión obtenida para el ensanchamiento natural, por lo que el perfil de la línea será nuevamente una función de Lorentz. Para este caso, el ancho a media altura será:

$$\delta\nu_i = \frac{1}{2\pi\bar{t}}$$



ρ de una partícula P con una velocidad relativa v perturbando a un átomo A.

$$\delta\nu_i = \frac{1}{2\pi\bar{t}}$$

Aproximación de impacto. En esta aproximación, basada en el punto anterior, se supone una colisión casi instantánea, en la que la duración de esta es mucho menor al tiempo promedio entre cada choque. La duración de una colisión se puede estimar en términos de una velocidad relativa media, $\bar{v}$ entre las dos partículas y una distancia de máximo acercamiento entre las mismas. Dicha distancia es conocida como parámetro de impacto (véase la figura) y se representa por ρ . El tiempo medio entre colisiones, $\bar{t}$, se puede estimar por medio de:

$$\bar{t} \simeq \frac{\rho}{\bar{v}}$$

Para este caso, podemos usar la ecuación del caso anterior y aplicar los criterios de la aproximación (es decir, $\tau_c < \bar{t}$) y la expresión anterior para obtener la siguiente desigualdad:

$$\delta\nu_i < \frac{\bar{v}}{2\pi\rho}$$

$$|\nu_0 - \nu| < \frac{\bar{v}}{2\pi\rho}$$

Debido a la similitud con las expresiones de casos anteriores, se puede notar que la forma del perfil de la línea será nuevamente lorentziana. Sin embargo, en este caso

la existencia de varios posibles parámetros de impacto provoca un desplazamiento de la línea. Para que la línea sea perturbada, el parámetro de impacto debe ser menor a un parámetro de impacto crítico, conocido como radio de Weisskopf. La forma de la línea en este caso será:

$$I(\nu) = I_0 \frac{(w/2)^2}{(\nu - \nu_0 - d)^2 + (w/2)^2}$$

En donde w y d son el ancho a media altura y el desplazamiento en frecuencia, respectivamente.

La línea de hidrógeno, línea de 21 centímetros o la línea HI consiste en la línea espectral de la radiación electromagnética que se crea por un cambio en el estado de energía de los átomos de hidrógeno neutro. Esta radiación electromagnética está en la frecuencia exacta de 1420,405751786 MHz, equivalente a la longitud de onda de 21,10611405413 cm en el vacío. Esta longitud de onda o frecuencia se encuentra dentro de la región de radio de microondas del espectro electromagnético, y son observadas con frecuencia en la radioastronomía, ya que esas ondas de radio pueden penetrar en las grandes nubes de polvo cósmico interestelar que son opacas a la luz visible.

Las microondas de la línea de hidrógeno proceden de la transición atómica entre los dos niveles hiperfinos del estado fundamental 1s del hidrógeno con una diferencia de energía de 5,87433 μeV. La frecuencia de los cuantos que se emiten por esta transición entre dos niveles de energía diferentes se da por la ecuación de Planck.

Recientemente el análisis de la radiación de 21 cm proveniente del hidrógeno del universo primitivo ha permitido fechar la aparición de las primeras estrellas del universo en unos 200 millones de años después del big-bang.

Líneas de Balmer

El espectro visible las líneas de emisión del hidrógeno en la serie de Balmer. H-α (alfa) es la línea roja a la derecha. Las dos líneas más a la izquierda son ultravioleta, ya que tienen longitudes de onda inferior a 400 nm.

En física atómica, la serie de Balmer es el conjunto de líneas que resultan de la emisión del átomo de hidrógeno cuando un electrón transita desde un nivel $n \geq 3$ a $n = 2$ (donde n representa el número cuántico principal referente al nivel de energía del electrón). Las transiciones son denominadas secuencialmente por letras griegas: desde n = 3 a n = 2 es llamada H-alpha, 4 a 2 es H-beta, 5 a 2 es H-gamma, etc.

La longitud de onda, para cada línea de Balmer, se puede calcular mediante la fórmula de Rydberg:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

donde R_H es la constante de Rydberg para el hidrógeno (aproximadamente 109 677 cm^{-1}, o 1,097 x 107 m-1), l = 2 y m un entero mayor que 2.

Transición de 3→2 4→2 5→2 6→2 7→2 8→2 9→2

Nombre H-α H-β H-γ H-δ H-ε H-ζ H-η
Longitud de onda (nm) 656,3 486,1 434,1 410,2 397,0 388,9 383,5 364,6
Color Rojo Azul-verde Violeta Violeta (Ultravioleta) (Ultravioleta) (Ultravioleta) (Ultravioleta)

LÍNEAS ESPECTRALES

El fabricante de telescopios y físico Joseph von Fraunhofer (1787-1826) descubrió una serie de líneas oscuras (un espectro de absorción) presente en el espectro solar continuo. Estas líneas de Fraunhofer establecieron la presencia de elementos químicos individuales en el Sol.

El trabajo de Fraunhofer estimuló un gran interés en la espectroscopia y dio lugar al desarrollo de mejores técnicas e instrumentos. Al final del siglo XIX, la espectroscopia había llegado a ser un campo de la física perfectamente desarrollado. Se habían medido con todo cuidado los espectros de la mayoría de los elementos y se contaba con tablas detalladas de longitudes de onda. Pero aun así no se comprendían las razones de la existencia de las líneas espectrales.

En 1885, un maestro de escuela suizo, Johann Jacob Balmer, descubrió una sencilla fórmula matemática que relacionaba las longitudes de onda de las líneas prominentes en el espectro visible y en el cercano al ultravioleta del gas hidrógeno. (El hidrógeno tiene uno de los espectros atómicos más simples.) La fórmula de Balmer para la longitud de onda λ de las líneas de hidrógeno es

$$\lambda = B \left(\frac{m^2}{m^2 - n^2} \right) = B \left(\frac{m^2}{m^2 - 2^2} \right)$$

donde B=364.56 nm, n=2 y m es un entero que toma los valores: 3, 4, 5, 6, ...

Las líneas correspondientes que se observan en el espectro visible del hidrógeno se denominan Series de Balmer.

Con esta fórmula, Balmer calculó las longitudes de onda de las nueve líneas (cuatro visibles y cinco ultravioletas) que entonces se sabía existían en el espectro de hidrógeno. La fórmula de Balmer era estrictamente empírica. Esto significa que no

se había deducido de ningún modelo o teoría del comportamiento físico; más bien, Balmer ofreció su fórmula sólo como una relación matemática que era consistente con las observaciones. En apariencia no había razón de por qué debía funcionar. A pesar de eso, proporcionó un cálculo sorprendentemente preciso de las longitudes de onda en el espectro de hidrógeno. Incluso en el peor de los casos, el cual ocurriría para n=11, las longitudes de onda calculadas por Balmer estaban dentro de 0,1% del valor medido.

Al dar a conocer su fórmula, Balmer sugirió que quizá fuera un caso especial de alguna fórmula más general que se aplicará a otras series de líneas en otros elementos. El espectroscopista sueco Johannes Robert Rydberg inició entonces la búsqueda de una fórmula con dichas características. En 1889, a partir de la gran cantidad de datos disponibles, Rydberg encontró varias series espectrales que encajaban en una fórmula empírica que él demostró era equivalente a la fórmula de Balmer. La fórmula de Rydberg puede escribirse para producir el recíproco de la longitud de onda de la luz emitida como:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\mathrm{H}} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{siendo } n_1 < n_2$$

Donde RH es la constante de Rydberg= 10 973 758,306 m-1 y n1 y n2 son números enteros. Para la serie de Balmer, n1= 2 y n2 toma los valores de 3, 4, 5, 6… A medida que n1 se vuelve más grande, las líneas convergen hacia un límite de la serie.

Observaciones anteriores de otros espectroscopistas confirmaron series espectrales adicionales en el infrarrojo y el ultravioleta para el hidrógeno, lo que correspondía a otros valores de n1= 1, 3, 4 y 5. En 1900 se sabía que las fórmulas matemáticas podían proporcionar cálculos muy exactos de las líneas espectrales en el hidrógeno. Sin embargo, en relación con la estructura atómica nadie había ideado ningún modelo que explicara la existencia de los espectros observados ni por qué la fórmula de Rydberg funcionaba tan bien.

Serie de Lyman

En mecánica cuántica, la serie de Lyman es el conjunto de líneas que resultan de la emisión del átomo del hidrógeno cuando un electrón transita de n ≥ 2 a n = 1 (donde n representa el número cuántico principal referente al nivel de energía del electrón). Las transiciones son denominadas secuencialmente mediante letras griegas: desde n = 2 a n = 1, es llamada Lyman-alfa; de 3 a 1, Lyman-beta; de 4 a 1, Lyman-gamma, etc.

La primera línea en el espectro ultravioleta de la serie de Lyman fue descubierta en 1906 por el físico de la Universidad de Harvard llamado Theodore Lyman, quien estudiaba el espectro ultravioleta del gas de hidrógeno eléctricamente excitado. El resto de las líneas del espectro fueron descubiertas por Lyman entre 1906 y 1914. El espectro de la radiación emitido por el hidrógeno no es continuo.

Históricamente, explicar la naturaleza del espectro del hidrógeno era un problema considerable para la física. Nadie pudo predecir las longitudes de onda de las líneas de hidrógeno hasta 1885, cuando el desarrollo de la fórmula de Balmer ofreció una posibilidad empírica para visibilizar el espectro de hidrógeno. Cinco años después Johannes Rydberg enunció otra fórmula empírica para resolver el problema, presentada por primera vez en 1888 y cuya forma final apareció en 1890. Rydberg quería encontrar una fórmula para ligar las ya conocidas líneas de emisión de la serie de Balmer, y para predecir aquellas aún no descubiertas. Diferentes versiones de la fórmula de Rydberg con diferentes números simples fueron halladas para generar diferentes series de líneas.

Obtención de la serie de Lyman

La versión de la fórmula de Rydberg que generó la serie de Lyman era:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \qquad \left(R = 1.0972 \times 10^7 \mathrm{m}^{-1}\right)$$

donde n es un número natural mayor o igual a 2 (es decir n = 2, 3, 4,...).

Además, las líneas vistas en la imagen son las longitudes de onda correspondientes a n=2 en la derecha, a n=∞en la izquierda (pues existen infinitas líneas espectrales, pero se condensan demasiado a medida que se aproxima a n=∞, por lo que sólo algunas de las primeras líneas y la última aparecen efectivamente).

Las longitudes de onda (nm) en la serie de Lyman son todos ultravioletas:
n 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11

Longitud de onda(nm) 121.6 102.5 97.2 94.9 93.7 93.0 92.6 92.3 92.1 91.9 91.15
Explicación y derivación

En 1913, cuando Niels Bohr produjo su teoría del modelo atómico, la razón por la cual las líneas espectrales de hidrógeno se ajustan a la fórmula de Rydberg pudo ser explicada. Bohr vio que el salto del electrón al átomo del hidrógeno debía tener niveles de energía cuantizada descritos en la siguiente fórmula:

$$E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2}[\mathrm{eV}]$$

Según la tercera suposición de Bohr, donde sea que caiga un electrón desde un nivel inicial de energía (E_i) a un nivel final de energía (E_f), el átomo debería emitir radiación con una longitud de onda de:

$$\lambda = \frac{hc}{E_i - E_f}$$

Hay además una notación más cómoda cuando se trata de energía en unidades de electronvoltios y longitudes de onda expresadas en angstroms:

$$\lambda[A] = \frac{12430}{E_i[eV] - E_f[eV]}$$

Reemplazando la energía en la fórmula de arriba con la expresión para la energía en el átomo de hidrógeno, donde la energía inicial corresponde al nivel de energía n y la energía final corresponde al nivel de energía m:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_i - E_f}{12430} = \left(\frac{12430}{13.6}\right)^{-1}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

donde R es la misma constante de Rydberg de la fórmula de Rydberg.

Para conectar a Bohr, Rydberg, y Lyman, se debe reemplazar m por 1 (ya que el nivel energético base desde donde se forma la serie de Lyman es el nivel energético 1) para obtener:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$$

la cual es la fórmula de Rydberg para la serie de Lyman. Además, cada longitud de onda de las líneas de emisión corresponden a un electrón cayendo de un cierto nivel de energía (mayor que 1) al primer nivel de energía.

Serie de Paschen

En física cuántica, la serie de Paschen (también llamada serie de Ritz-Paschen) es la serie de transiciones y líneas de emisión resultantes del átomo hidrógeno cuando electrón salta de un estado de n ≥ 4 a n = 3, donde n se refiere al número cuántico principal del electrón. Las transiciones son denominadas secuencialmente con letras griegas: n = 4 a n = 3 es llamada Paschen-alfa, 5 a 3 es Paschen-beta, 6 a 3 es Paschen-gamma, etc.

Obtuvieron su nombre después de que el físico alemán, Friedrich Paschen las observa por primera vez en 1908.

Las longitudes de onda (nm) de las líneas de la serie de Paschen se encuentran en el infrarrojo cercano y son:

n 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13
Longitud de onda en el aire (nm) 1875,1 1281,8 1093,8 1004,9 954,6 922,9 901,5 886,3 875,0 866,5 820,4

Serie de Pfund

En Física, la serie de Pfund es una serie de absorción o de emisión lineal del hidrógeno atómico.

Las líneas fueron experimentalmente descubiertas en 1924 por August Herman Pfund, y corresponden al electrón que salta el quinto y más altos niveles de energía del átomo de hidrógeno. (se dice que a partir del n=6 comienzan las líneas, entonces el n=6 es la primera línea, el n=7 es la segunda línea, y así consecutivamente. Esto se aplica a las otras series, teniendo en cuenta el n para cada serie)

Las longitudes de ondas para transiciones consecutivas son:

6 7 8 9 10 infinito
Longitud de onda (nm) 7476 4664 3749 3304 3046 2279

Serie Brackett (n = 4)

El nombre del físico estadounidense Frederick Sumner Brackett, quien observó por primera vez las líneas espectrales en 1922. Las líneas espectrales de la serie Brackett se encuentran en la banda del infrarrojo lejano.

Cuestionario:

1.- ¿Qué es una línea espectral?

2.- ¿Qué es la línea de hidrógeno?

3.- Describir detalladamente los siguientes conceptos:

-Fórmula de Rydberg

-Serie de Lyman

-Serie de Paschen

-Serie de Brackett

-Serie de Pfund

Debate 38. Principio de correspondencia y postulado de Bohr

- Postulados de Bohr
  https://www.youtube.com/watch?v=Li30ZNUeBJA
  https://www.youtube.com/watch?v=eV_eA3opiqE

- Principio de correspondencia
  https://www.youtube.com/watch?v=5surMyHnCIE
  https://www.youtube.com/watch?v=ArV_j5f5dRM

El principio de correspondencia fue primeramente postulado por Niels Bohr en 1923. Las leyes de la mecánica cuántica son altamente exitosas en describir objetos microscópicos tales como átomos y partículas elementales.

Por otra parte, se sabe por experimentos que una variedad de sistemas macroscópicos (sólidos rígidos, condensadores eléctricos, etc.) pueden ser descritos con exactitud por teorías clásicas tales como la mecánica clásica y el electromagnetismo. Por el contrario, es razonable creer que las máximas leyes de la Física deben de ser independientes del tamaño del objeto físico descrito. Esta fue la motivación para la creación del principio de correspondencia de Bohr, el cual establece que la física clásica debe de emerger como una aproximación a la física cuántica a medida que los sistemas aumentan de tamaño.

Las condiciones por las cuales la física cuántica y la física clásica concuerdan es lo que se denomina el principio de correspondencia, o el límite clásico. La prescripción que Bohr suministró para el límite clásico fue áspera: ocurre cuando los números cuánticos que describen el sistema son grandes, lo que quiere decir que algunos números cuánticos están excitados a valores muy altos o que el sistema es descrito por un conjunto grande de números cuánticos, o ambas cosas.

El principio de correspondencia es la única herramienta que los físicos poseen para seleccionar teorías cuánticas correspondientes a la relatividad. Los principios de la mecánica cuántica Son completamente abiertos - por ejemplo, establecen que los estados de un sistema físico ocupan un espacio de Hilbert, pero no aclaran qué tipo de espacio de Hilbert. El principio de correspondencia limita las opciones a las que reproducen la mecánica clásica en el límite de correspondencia. Por esta razón, Bohm ha afirmado que la física clásica no emerge de la física cuántica del mismo modo en que la mecánica clásica emerge de la aproximación de la relatividad especial a velocidades pequeñas, sino que la física clásica existe independientemente de la teoría cuántica y no se puede derivar de ella.

El modelo atómico de Bohr

Es un modelo clásico del átomo, pero fue el primer modelo atómico en el que se introduce una cuantización a partir de ciertos postulados. Dado que la cuantización del momento es introducida en forma adecuada (ad hoc), el modelo puede considerarse transaccional en cuanto a que se ubica entre la mecánica clásica y la cuántica. Fue propuesto en 1913 por el físico danés Niels Bohr, para explicar cómo los electrones pueden tener órbitas estables alrededor del núcleo y por qué los átomos presentaban espectros de emisión característicos (dos problemas que eran ignorados en el modelo previo de Rutherford). Además el modelo de Bohr incorporaba ideas tomadas del efecto fotoeléctrico, explicado por Albert Einstein.

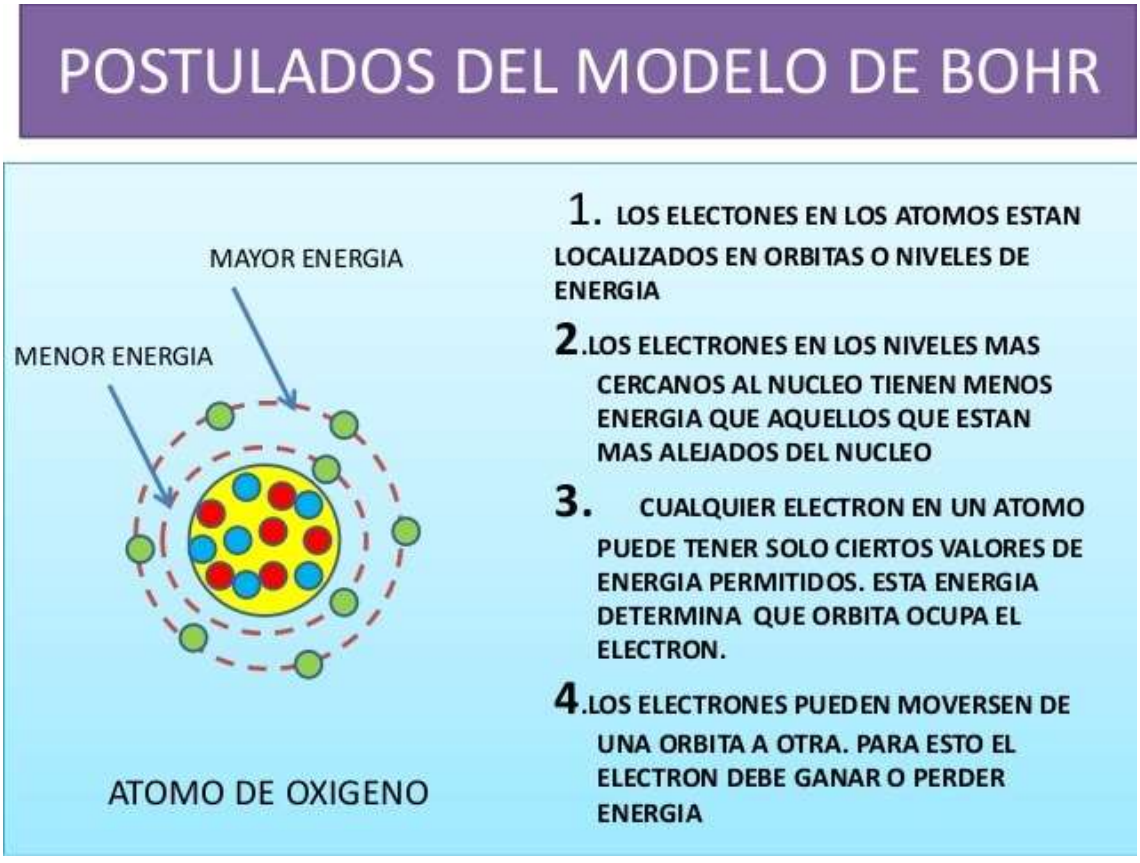
Introducción

Bohr intentaba hacer un modelo atómico capaz de explicar la estabilidad de la materia y los espectros de emisión y absorción discretos que se observan en los gases. Describió el átomo de hidrógeno con un protón en el núcleo, y girando a su alrededor un electrón. El modelo atómico de Bohr partía conceptualmente del modelo atómico de Rutherford y de las incipientes ideas sobre cuantización que habían surgido unos años antes con las investigaciones de Max Planck y Albert Einstein.

En este modelo los electrones giran en órbitas circulares alrededor del núcleo, ocupando la órbita de menor energía posible, o la órbita más cercana posible al

núcleo. El electromagnetismo clásico predecía que una partícula cargada moviéndose de forma circular emitirá energía por lo que los electrones deberían colapsar sobre el núcleo en breves instantes de tiempo. Para superar este problema Bohr supuso que los electrones solamente se podían mover en órbitas específicas, cada una de las cuales caracterizada por su nivel energético. Cada órbita puede entonces identificarse mediante un número entero n que toma valores desde 1 en adelante. Este número "n" recibe el nombre de número cuántico principal.

Bohr supuso además que el momento angular de cada electrón estaba cuantizado y sólo podía variar en fracciones enteras de la constante de Planck. De acuerdo al número cuántico principal calculó las distancias a las cuales se hallaba del núcleo cada una de las órbitas permitidas en el átomo de hidrógeno. Estos niveles en un principio estaban clasificados por letras que empezaban en la "K" y terminaban en la "Q". Posteriormente los niveles electrónicos se ordenaron por números. Cada órbita tiene electrones con distintos niveles de energía obtenida que después se tiene que liberar y por esa razón el electrón va saltando de una órbita a otra hasta llegar a una que tenga el espacio y nivel adecuado, dependiendo de la energía que posea, para liberarse sin problema y de nuevo volver a su órbita de origen. Sin embargo no explicaba el espectro de estructura fina que podría ser explicado algunos años más tarde gracias al modelo atómico de Sommerfeld. Históricamente el desarrollo del modelo atómico de Bohr junto con la dualidad onda-corpúsculo permitiría a Erwin Schrödinger descubrir la ecuación fundamental de la mecánica cuántica.



Postulados de Bohr

En 1913, Niels Bohr desarrolló su célebre modelo atómico de acuerdo a tres postulados fundamentales

Primer postulado

Los electrones describen órbitas circulares en torno al núcleo del átomo sin irradiar energía.

La causa de que el electrón no irradie energía en su órbita es, de momento, un postulado, ya que según la electrodinámica clásica una carga con un movimiento acelerado debe emitir energía en forma de radiación.

Para mantener la órbita circular, la fuerza que experimenta el electrón —la fuerza coulombiana por la presencia del núcleo— debe ser igual a la fuerza centrípeta. Esto nos da la siguiente expresión:

$$k\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

Donde el primer término es la fuerza eléctrica o de Coulomb, y el segundo es la fuerza centrípeta; k es la constante de la fuerza de Coulomb, Z es el número atómico del átomo, ees la carga del electrón, es la masa del electrón, v es la velocidad del electrón en la órbita y r el radio de la órbita.

En la expresión anterior podemos despejar el radio, obteniendo:

$$r = k\frac{Ze^2}{m_e v^2}$$

Y ahora, con esta ecuación, y sabiendo que la energía total es la suma de las energías cinética y potencial:

$$E = T + V = \frac{1}{2}m_e v^2 - k\frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2}\frac{kZe^2}{r}$$

Donde queda expresada la energía de una órbita circular para el electrón en función del radio de dicha órbita.

Nota: a veces puede verse escrita en términos de la permitividad del vacío $k = 1/4\pi\epsilon_0$, o en unidades electroestáticas de carga: k=1.

Segundo postulado

Las únicas órbitas permitidas para un electrón son aquellas para las cuales el momento angular, L, del electrón sea un múltiplo entero de $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Esta condición matemáticamente se escribe:

$$L = m_e v r = n\hbar$$

con $n = 1, 2, 3, \ldots$

A partir de esta condición y de la expresión para el radio obtenida antes, podemos sustituir v y queda la condición de cuantización para los radios permitidos:

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{k m_e Z e^2}$$

con $n = 1, 2, 3, \cdots$; subíndice introducido en esta expresión para resaltar que el radio ahora es una magnitud discreta, a diferencia de lo que decía el primer postulado.

Ahora, dándole valores a n, numero cuántico principal,, obtenemos los radios de las órbitas permitidas. Al primero de ellos (con n=1), se le llama radio de Bohr :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{k m_e e^2} = 0.529$$

expresando el resultado en angstroms .

Del mismo modo podemos ahora sustituir los radios permitidos r_{n} en la expresión para la energía de la órbita y obtener así la energía correspondiente a cada nivel permitido:

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{k^2 m_e Z^2 e^4}{n^2\hbar^2}$$

Igual que antes, para el átomo de Hidrógeno (Z=1) y el primer nivel permitido (n=1), obtenemos:

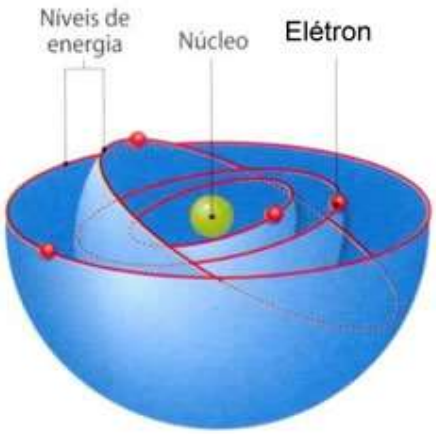
$$E_0 = -\frac{1}{2}\frac{k^2 m_e e^4}{\hbar^2} = -13.6 \text{ eV}$$

que es la llamada energía del estado fundamental del átomo de Hidrógeno. Y podemos expresar el resto de energías para cualquier Z y n como:

$$E_n = \frac{Z^2}{n^2} E_0$$

$$k\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

Este postulado, sin embargo, es incompatible con la mecánica cuántica moderna porque (1) presupone que v y r (y el momento cinético) adquieren valores bien definidos, en contradicción con el principio de incertidumbre, y (2) atribuye al primer nivel un valor no nulo del momento cinético.



Tercer postulado

El electrón solo emite o absorbe energía en los saltos de una órbita permitida a otra. En dicho cambio emite o absorbe un fotón cuya energía es la diferencia de energía entre ambos niveles. Este fotón, según la ley de Planck tiene una energía:
$E_\gamma = h\nu = E_{n_f} - E_{n_i}$

donde n_i identifica la órbita inicial y n_f la final, y v es la frecuencia.

Entonces las frecuencias de los fotones emitidos o absorbidos en la transición serán:

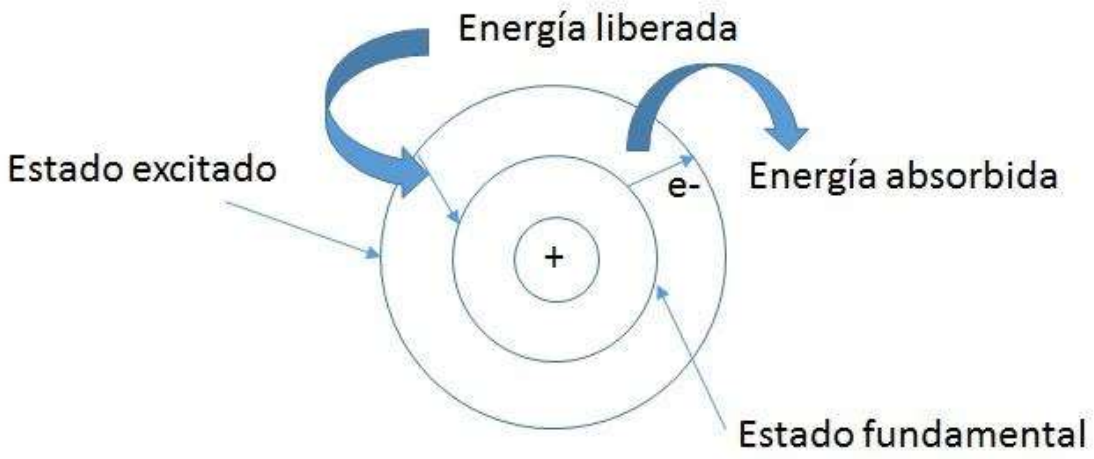
$$\nu = \frac{k^2 m_e Z^2 e^4}{2h\hbar^2}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right)$$

Esta última expresión fue muy bien recibida porque explicaba teóricamente la fórmula fenomenológica hallada antes por Balmer para describir las líneas espectrales observadas desde finales del siglo XIX en la desexcitación del Hidrógeno, que venían dadas por:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

con n=3,4,5,..., y donde R_H es la Constante de Rydberg para el hidrógeno. Y como vemos, la expresión teórica para el caso $n_f = 2$, es la expresión predicha por Balmer, y el valor medido experimentalmente de la constante de Rydberg ($1.09710^7 m^{-1}$), coincide con el valor de la fórmula teórica.

Se puede demostrar que este conjunto de hipótesis corresponde a la hipótesis de que los electrones estables orbitando un átomo están descritos por funciones de onda estacionarias. Un modelo atómico es una representación que describe las partes que tiene un átomo y como están dispuestas para formar un todo. Basándose en la constante de Planck E=hv consiguió cuantizar las órbitas observando las líneas del espectro.



Láser

Un láser (del acrónimo inglés LASER, light amplification by stimulated emission of radiation; Luz amplificada por emisión de radiación estimulada) es un dispositivo que utiliza un efecto de la mecánica cuántica, la emisión inducida o estimulada, para generar un haz de luz coherente tanto espacial como temporalmente. La coherencia espacial se corresponde con la capacidad de un haz para permanecer con un pequeño tamaño al transmitirse por el vacío en largas distancias y la coherencia temporal se relaciona con la capacidad para concentrar la emisión en un rango espectral muy estrecho.

Historia

En 1915, Albert Einstein estableció los fundamentos para el desarrollo de los láseres y de sus predecesores, los máseres (que emiten microondas), utilizando la ley de radiación de Max Planck basada en los conceptos de emisión espontánea e inducida de radiación.

En 1928, Rudolf Ladenburg informó haber obtenido la primera evidencia del fenómeno de emisión estimulada de radiación, aunque no pasó de ser una curiosidad de laboratorio, por lo que la teoría fue olvidada hasta después de la Segunda Guerra Mundial, cuando fue demostrada definitivamente por Willis Eugene Lamb y R. C. Rutherford.

En 1953, Charles H. Townes y los estudiantes de postgrado James P. Gordon y Herbert J. Zeiger construyeron el primer máser: un dispositivo que funcionaba con los mismos principios físicos que el láser pero que produce un haz coherente de microondas. El máser de Townes era incapaz de funcionar en continuo. Nikolái Básov y Aleksandr Prójorov de la Unión Soviética trabajaron independientemente en el oscilador cuántico y resolvieron el problema de obtener un máser de salida de luz continua, utilizando sistemas con más de dos niveles de energía.

Townes, Básov y Prójorov compartieron el Premio Nobel de Física en 1964 por «los trabajos fundamentales en el campo de la electrónica cuántica», los cuales condujeron a la construcción de osciladores y amplificadores basados en los principios de los máser-láser.

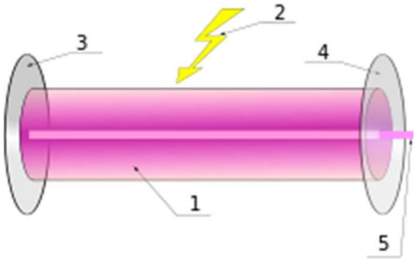
El primer láser CONSTRUIDO fue uno de rubí y funcionó por primera vez el 16 de mayo de 1960. Fue construido por Theodore Maiman. El hecho de que sus resultados se publicaran con algún retraso en Nature, dio tiempo a la puesta en marcha de otros desarrollos paralelos. Por este motivo, Townes y Arthur Leonard Schawlow también son considerados inventores del láser, el cual patentaron en 1960. Dos años después, Robert Hallinventa el láser generado por semiconductor. En 1969 se encuentra la primera aplicación industrial del láser al ser utilizado en las soldaduras de los elementos de chapa en la fabricación de vehículos y, al año siguiente Gordon Gould patenta otras muchas aplicaciones prácticas para el láser.

El 16 de mayo de 1980, un grupo de físicos de la Universidad de Hull liderados por Geoffrey Pert registran la primera emisión láser en el rango de los rayos X. Pocos meses después se comienza a comercializar el disco compacto, donde un haz láser de baja potencia «lee» los datos codificados en forma de pequeños orificios (puntos y rayas) sobre un disco óptico con una cara reflectante. Posteriormente esa secuencia de datos digitales se transforma en una señal analógica permitiendo la escucha de los archivos musicales. En 1984, la tecnología desarrollada comienza a

usarse en el campo del almacenamiento masivo de datos. En 1994, en el Reino Unido, se utiliza por primera vez la tecnología láser en cinemómetros para detectar conductores con exceso de velocidad. Posteriormente se extiende su uso por todo el mundo.

Ya en el siglo XXI, científicos de la Universidad de St. Andrews crean un láser que puede manipular objetos muy pequeños. Al mismo tiempo, científicos japoneses crean objetos del tamaño de un glóbulo rojo utilizando el láser. En 2002, científicos australianos «teletransportan» con éxito un haz de luz láser de un lugar a otro. Dos años después el escáner láser permite al Museo Británico efectuar exhibiciones virtuales. En 2006, científicos de Intel descubren la forma de trabajar con un chip láser hecho con silicio abriendo las puertas para el desarrollo de redes de comunicaciones mucho más rápidas y eficientes.

Elementos básicos de un láser



Ejemplo de dispositivo de emisión láser típico:
1. Medio activo con ganancia óptica
2. Energía de bombeo para el láser
3. Espejo de alta reflectancia
4. Espejo de acoplamiento o salida
5. Emisión del haz láser

Un láser típico consta de tres elementos básicos de operación. Una cavidad óptica resonante, en la que la luz puede circular, que consta habitualmente de un par de espejos de los cuales uno es de alta reflectancia (cercana al 100 %) y otro conocido como acoplador, que tiene una reflectancia menor y que permite la salida de la radiación láser de la cavidad.

Dentro de esta cavidad resonante se sitúa un medio activo con ganancia óptica, que puede ser sólido, líquido o gaseoso (habitualmente el gas se encontrará en estado de plasma parcialmente ionizado) que es el encargado de amplificar la luz. Para poder amplificar la luz, este medio activo necesita un cierto aporte de energía, llamada comúnmente bombeo. Este bombeo es generalmente un haz de luz (bombeo óptico) o una corriente eléctrica (bombeo eléctrico).

Cavidad láser

La cavidad óptica resonante, conocida también como cavidad láser, existe en la gran mayoría de los dispositivos láser y sirve para mantener la luz circulando a través del medio activo el mayor número de veces posible. Generalmente está compuesta de dos espejos dieléctricos que permiten reflectividades controladas que pueden ser muy altas para determinadas longitudes de onda.

El espejo de alta reflectividad refleja cerca del 100 % de la luz que recibe y el espejo acoplador o de salida, un porcentaje ligeramente menor. Estos espejos pueden ser planos o con determinada curvatura, que cambia su régimen de estabilidad.

Según el tipo de láser, estos espejos se pueden construir en soportes de vidrio o cristales independientes o en el caso de algunos láseres de estado sólido pueden construirse directamente en las caras del medio activo, disminuyendo las necesidades de alineación posterior y las pérdidas por reflexión en las caras del medio activo.

Algunos láseres de excímero o la mayoría de los láser de nitrógeno, no utilizan una cavidad propiamente dicha, en lugar de ello un solo espejo reflector se utiliza para dirigir la luz hacia la apertura de salida. Otros láser como los construidos en microcavidades ópticas emplean fenómenos como la reflexión total interna para confinar la luz sin utilizar espejos.

Medio activo

El medio activo es el medio material donde se produce la amplificación óptica. Puede ser de muy diversos materiales y es el que determina en mayor medida las propiedades de la luz láser, longitud de onda, emisión continua o pulsada, potencia, etc.

El medio activo es donde ocurren los procesos de excitación (electrónica o de estados vibracionales) mediante bombeo de energía, emisión espontánea y emisión estimulada de radiación. Para que se dé la condición láser, es necesario que la ganancia óptica del medio activo sea superior a las pérdidas de la cavidad más las pérdidas del medio.

Dado que la ganancia óptica es el factor limitante en la eficiencia del láser, se tiende a buscar medios materiales que la maximicen, minimizando las pérdidas, es por esto que si bien casi cualquier material puede utilizarse como medio activo, solo algunas decenas de materiales son utilizados eficientemente para producir láseres.

Con mucha diferencia, los láseres más abundantes en el mundo son los de semiconductores. Pero también son muy comunes los láseres de estado sólido y en

menor medida los de gas. Otros medios son utilizados principalmente en investigación o en aplicaciones industriales o médicas muy concretas.

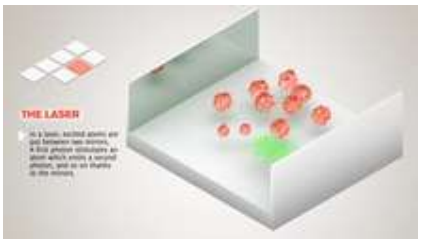
Bombeo

Para que el medio activo pueda amplificar la radiación, es necesario excitar sus niveles electrónicos o vibracionales de alguna manera. Comúnmente un haz de luz (bombeo óptico) de una lámpara de descarga u otro láser o una corriente eléctrica (bombeo eléctrico) son empleados para alimentar al medio activo con la energía necesaria.

El bombeo óptico se utiliza habitualmente en láseres de estado sólido (cristales y vidrios) y láseres de colorante (líquidos y algunos polímeros) y el bombeo eléctrico es el preferido en láseres de semiconductores y de gas. En algunas raras ocasiones se utilizan otros esquemas de bombeo que le dan su nombre, por ejemplo a los láseres químicos o láseres de bombeo nuclear9 que utilizan la energía de la fisión nuclear.

Debido a las múltiples pérdidas de energía en todos los procesos involucrados, la potencia de bombeo siempre es mayor a la potencia de emisión láser.

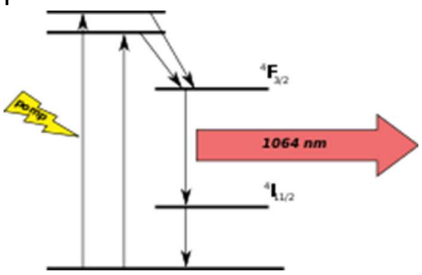
Mecanismos de la acción láser



https://es.wikipedia.org/wiki/Láser

Animación que explica los principios de emisión estimulada y el láser

Si bien existen varios mecanismos que producen emisión láser, se describe el ejemplo sencillo de un láser de cuatro niveles con bombeo óptico continuo, como puede ser el láser de neodimio.



Niveles electrónicos involucrados en la emisión láser de iones de neodimio trivalentes.

Absorción del bombeo y transiciones no radiactivas

En el estado inicial, la mayoría de los electrones se encuentran en el Estado fundamental y son excitados mediante un haz de luz de bombeo que contiene energía en las bandas de absorción del neodimio. Los electrones excitados en varios niveles se desexcitan rápidamente de forma no radiativa hacia un nivel metaestable, que en el caso del neodimio es el 4F3/2 donde permanece un tiempo relativamente largo, decayendo lentamente al nivel fundamental y al nivel 4I11/2. Si se cumplen ciertas condiciones en el material y la potencia de bombeo, es posible que se produzca la inversión de población, esto es, que existan más átomos excitados en el nivel 4F3/2 que los que están en el nivel inferior 4I11/2.

Emisión estimulada

Desde el nivel metaestable 4F3/2 pueden desexcitarse espontáneamente algunos electrones que producen una emisión de luz a 1 064 nm. Algunos de estos se emiten en el ángulo correcto para reflejarse por los espejos de la cavidad un número elevado de veces. Estos fotones que se reflejan con el ángulo correcto pasan varias veces cerca de átomos excitados de neodimio y producen la emisión estimulada de radiación.

Si el medio activo se encuentra en la condición de inversión de población y las pérdidas de la cavidad son inferiores a la ganancia del medio activo, ocurre que al reflejarse en las paredes de la cavidad se produce una amplificación del primer fotón que se emitió espontáneamente. Tras un número determinado de reflexiones, la intensidad dentro de la cavidad es muy elevada, y las pequeñas perdidas del espejo acoplador son la radiación láser que emite el dispositivo.

Clasificación de láseres según UNE EN 60825-1/A2-2002

Según la peligrosidad de los láseres y en función del Límite de Emisión Accesible (LEA) se pueden clasificar los láseres en las siguientes categorías de riesgo:

Clase 1: Seguros en condiciones razonables de utilización.

Clase 1M: Como la Clase 1, pero no seguros cuando se miran a través de instrumentos ópticos como lupas o binoculares.

Clase 2: Láseres visibles (400 a 700 nm). Los reflejos de aversión protegen el ojo aunque se utilicen con instrumentos ópticos.

Clase 2M: Como la Clase 2, pero no seguros cuando se utilizan instrumentos ópticos.

Clase 3R: Láseres cuya visión directa es potencialmente peligrosa pero el riesgo es menor y necesitan menos requisitos de fabricación y medidas de control que la Clase 3B.

Clase 3B: La visión directa del haz es siempre peligrosa, mientras que la reflexión difusa es normalmente segura.

Clase 4: La exposición directa de ojos y piel siempre es peligrosa y la reflexión difusa normalmente también. Pueden originar incendios y explosiones.

Aplicaciones

El tamaño de los láseres es muy variable, desde los diodos láser microscópicos (arriba) con numerosas aplicaciones, hasta el láser de cristales de neodimio con un tamaño similar al de un campo de fútbol, (abajo) usado para la fusión de confinamiento inercial, investigación sobre armas nucleares de destrucción masiva u otros experimentos físicos en los que se presenten altas densidades de energía.

Cuando se inventaron, en 1960, los láseres se calificaron como «una solución a la espera de un problema». Desde entonces, se han vuelto omnipresentes y actualmente pueden encontrarse en miles de aplicaciones, en campos muy variados, como la electrónica de consumo, la tecnología de la información, la investigación científica, la medicina, la industria y el sector militar.

En muchas aplicaciones, los beneficios de los láseres se deben a sus propiedades físicas, como la coherencia, la monocromaticidad y la capacidad de alcanzar potencias extremadamente altas. A modo de ejemplo, un haz láser muy coherente puede enfocarse por debajo de su límite de difracciónque, a longitudes de onda visibles, corresponde solamente a unos pocos nanómetros. Cuando se enfoca un haz de láser potente en un punto, este recibe una enorme densidad de energía. Esta propiedad permite al láser grabar gigabytes de información en las microscópicas cavidades de un CD, DVD o Blu-ray. También permite a un láser de media o baja potencia alcanzar intensidades muy altas y usarlo para cortar, quemar o incluso sublimar materiales. El rayo láser se emplea en el proceso de fabricación de grabar o marcar metales, plásticos y vidrio.

Tipos de láseres

Atendiendo a la naturaleza de su medio activo, podemos clasificar los dispositivos láser en:

Semiconductores

Diodos láser, es el emisor láser más común, utiliza una unión semiconductora p-n similar a la que se utiliza en los led pero en este caso está colocada en una cavidad reflectora. Son utilizados en punteros láser, impresoras láser, grabadores/reproductores de CD, DVD, Blu-Ray, HD-DVD y como energía de bombeo de muchos láseres de estado sólido.

Láser de punto cuántico, un tipo de láser semiconductor que usa puntos cuánticos como el medio activo en su región de emisión de luz. Debido al denso confinamiento de los portadores de carga en los puntos cuánticos, exhiben una estructura electrónica similar a la de los átomos.

Los láseres fabricados con medios tan activos exhiben un comportamiento bastante cercano a los láseres de gas, pero no presentan algunos de los inconvenientes asociados a los tradicionales láseres de semiconductores basados en medios activos sólidos o de pozo cuántico.

Se han observado mejoras en la modulación de ancho de banda, umbral de excitación, ruido relativo de intensidad, factor de realce de ancho de línea y estabilidad con la temperatura. La región activa del punto cuántico puede diseñarse para operar con diferentes longitudes de onda variando el tamaño y la composición del punto cuántico. Esto permite que este tipo de láser pueda fabricarse para operar en longitudes de onda imposibles de obtenerse con la tecnología de láser semiconductor actual.

Láser de cascada cuántica (comúnmente llamado QCL en inglés), funciona con inyección eléctrica en un material semiconductor estructurado. Bajo un determinado potencial eléctrico, la inversión de población es realizada cuando niveles energéticos de la banda de conducción se alinean de una forma determinada. Estos niveles energéticos se repiten de forma periódica a lo largo de toda la estructura del láser formando, desde el punto de vista energético, una serie de «cascadas» o «escalones energéticos». Un electrón, al recorrer una a una estas cascadas energéticas, genera quantos de luz, fotones, en cada uno de estos saltos energéticos.

LÁSER DE GAS

Láser de Helio-Neón, o láser HeNe, es un tipo de láser de gas que utiliza como medio activo una mezcla gaseosa de helio y neón. Los láseres de helio-neón emiten, habitualmente, a una longitud de onda de 633 nm, luz visible de color rojo.Son un tipo de láser habitual en laboratorios docentes o en el caso de láseres estabilizados, en aplicaciones de metrología de alta precisión.

El medio activo del láser es una mezcla de helio y de neón contenida en un tubo de vidrio cerrado, en una proporción de 5:1 aproximadamente y a una presión relativamente baja (habitualmente alrededor de 300 Pa). La energía para el bombeo se consigue con una descarga eléctrica de unos 1.000 V a través de dos electrodos situados a cada extremo del tubo. La cavidad resonante suele estar formada por un espejo plano de alta reflectancia en un extremo y un espejo cóncavo con una transmisión de un 1% al otro extremo, separados normalmente unos 15-20 cm. Los láseres de helio-neón tienen unas potencias de salida de entre 1 mW y 100 mW.

La longitud de onda es de 632.816 nm en el aire, que corresponde a una longitud de onda de 632,991 nm en el vacío. En cada caso particular, la longitud de onda obtenida se encuentra en un intervalo de 0.002 nm alrededor de este valor, debido a las fluctuaciones térmicas que provocan pequeñas oscilaciones de las dimensiones de la cavidad.

Láser de dióxido de Carbono, emite en el infrarrojo lejano a 10.6 μm.

Láser de Nitrógeno, emite en el UV a 337 nm normalmente en régimen de operación pulsado.

Láser excimer, el medio activo puede estar formado por diversas moléculas excímeras de vida muy corta formadas por gases nobles y halógenos, producen luz ultravioleta.

Láser de Argón, tiene varias líneas de emisión aunque las principales son 514 nm y 488 nm. Trabaja en régimen continuo con potencias de hasta unas decenas de W.

Estado sólido

Estos láseres emplean típicamente vidrios, cristales o fibras dopadas como medio activo. Aunque los semiconductores son también de estado sólido, se suelen tomar en una categoría diferente. Algunos láseres de estado sólido son:

Materiales dopados con tierras raras:

Láser neodimio-YAG, El medio activo es un cristal YAG (Yttrium Aluminium Garnet) dopado con neodimio trivalente. Emite en el infrarrojo cercano a 1064 nm. Es

frecuentemente convertido a verde 532 nm utilizando un cristal no lineal que dobla la frecuencia como por ejemplo, el KTP.

YAG dopado con erbio trivalente, emite a eficientemente a 2900 nm pero también puede operar a 1645 nm.

YAG dopado con tulio trivalente, que opera normalmente a 2015 nm.

YAG dopado con holmio trivalente, que emite a 2090 nm. Es absorbido de manera explosiva por tejidos impregnados de humedad en secciones de menos de un milímetro de espesor. Generalmente opera en modo pulsante y pasa a través de dispositivos quirúrgicos de fibra óptica. Se utiliza para quitar manchas de los dientes, vaporizar tumores cancerígenos y deshacer cálculos renales y vesiculares.

YVO dopado con neodimio trivalente. El medio activo es el ortovanadato de itrio, similar al Nd:YAG pero permite mayores eficiencias que este, en láseres continuos de potencia media-baja.

Láser de fibra dopada con erbio, un tipo de láser formado de una fibra óptica especialmente fabricada, se utiliza principalmente como amplificador para comunicaciones ópticas de larga distancia.

Materiales dopados con metales de transición:

Láser de rubí (Cristal de zafiro dopado con cromo trivalente). Fue el primer láser construido, en 1960, mediante una barra de rubí excitada por un pulso de flash de Xenón. Emite luz a 694.3 nm, visible como un rojo profundo.

Láser de zafiro dopado con titanio trivalente, es un láser sintonizable desde el rojo hasta el infrarrojo cercano, entre 650 y 1100 nm. Tienen la característica de, según el diseño óptico de la cavidad, puede operar en modo continuo o emitiendo pulsos ultra cortos.

Láser de Alejandrita, aluminato de berilio dopado con cromo trivalente. Emite típicamente en el infrarrojo cercano a 750 nm ,12 es usado en algunos sistemas de depilación.

Colorante o líquidos

Láser de colorante, formados por un colorante orgánico como la Rodamina 6G y un medio generalmente líquido que circula a través de la cavidad. Según el colorante utilizado, pueden operar en ultravioleta, visible o infrarrojo, con una potencia de 150 mW hasta 346 mW.

Aplicaciones del láser en la vida cotidiana

Telecomunicaciones: comunicaciones ópticas (fibra óptica), Radio Over Fiber.

Medicina: operaciones sin sangre, tratamientos quirúrgicos, ayudas a la cicatrización de heridas, tratamientos de piedras en el riñón, operaciones de vista, operaciones odontológicas.

Industria: cortado, guiado de maquinaria y robots de fabricación, mediciones de distancias precisas mediante láser.

Defensa: Guiado de misiles balísticos, alternativa al radar, cegando a las tropas enemigas. En el caso del Tactical High Energy Laser se está empezando a usar el láser como destructor de blancos.

Ingeniería civil: guiado de máquinas tuneladoras en túneles, diferentes aplicaciones en la topografía como mediciones de distancias en lugares inaccesibles o realización de un modelo.

Cuestionario:

1.- ¿Que establece el principio de correspondencia?

2.- Describe detalladamente cada uno de los postulados de Bohr?

3.- ¿Que es un láser y cómo funciona?

Debate 39. Configuración electrónica

Revisar estos videos:

- NÚMEROS CUÁNTICOS - Estructura electrónica del átomo - NUBE ELECTRÓNICA https://www.youtube.com/watch?v=fWYDkHRW-7A&t=16s 47:06

- NÚMEROS CUÁNTICOS

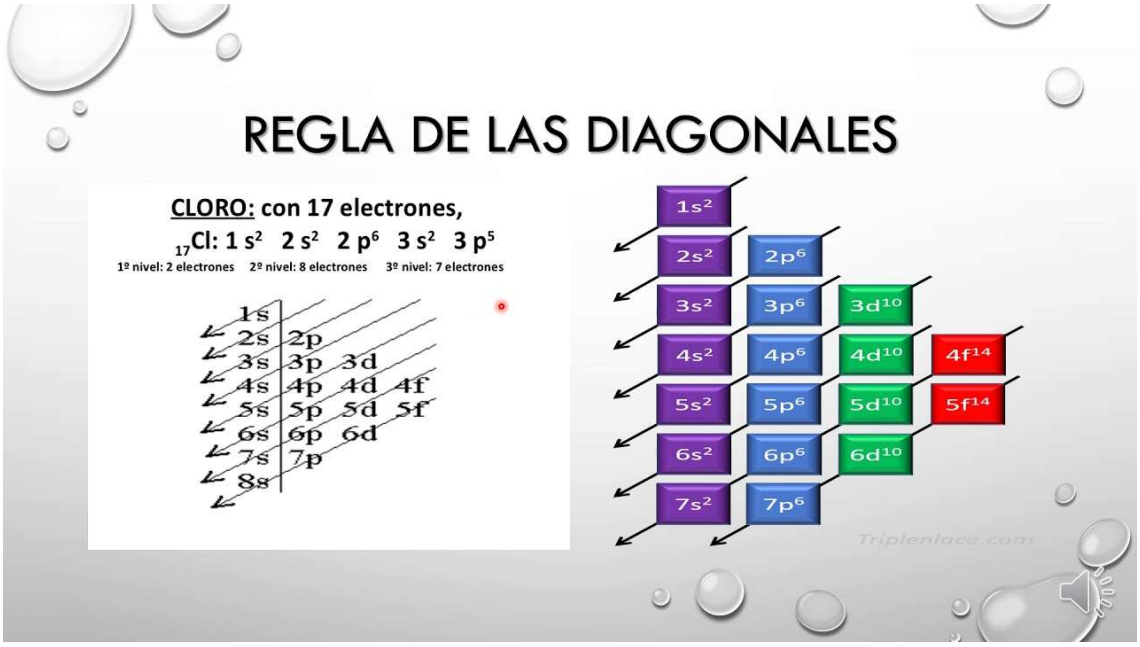
https://www.youtube.com/watch?v=zwisiN5XWh8 14:51

- QUÍMICA. Configuración electrónica
  https://www.youtube.com/watch?v=4MMvumKmqs4&t=1s 17:02

- NÚMEROS CUÁNTICOS Bien Fácil ! y CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA paso a paso
  https://www.youtube.com/watch?v=duBMJaF5J24 17:10
  https://www.youtube.com/watch?v=lBJwnzYZUJY 11:53

Configuración electrónica

La configuración electrónica indica la manera en la cual los electrones se estructuran, comunican u organizan en un átomo de acuerdo con el modelo de capas electrónicas, en el cual las funciones de ondas del sistema se expresan como un producto de orbitales antisimetrizado. La configuración electrónica es importante, ya que determina las propiedades totales de combinación química de los átomos y por lo tanto su posición en la tabla periódica de los elementos.



Introducción

La disposición de los electrones en los átomos está sujeta a las reglas de la mecánica cuántica. En particular la configuración electrónica viene dada por una combinación de estados cuánticos que son solución de la ecuación de Schrödinger para dicho átomo.

Una de las restricciones de la mecánica cuántica no explícitamente metida en la ecuación de Schrödinger es que cualquier conjunto de electrones en un mismo estado cuántico deben cumplir el principio de exclusión de Pauli por ser fermiones (partículas de espín semientero). Dicho principio implica que la función de onda total que describe dicho conjunto de electrones debe ser antisimétrica respecto del intercambio de dos electrones. Por lo tanto, en el momento en que un estado cuántico es ocupado por un electrón, el siguiente electrón debe ocupar un estado cuántico diferente.

En los estados estacionarios de un átomo, la función de onda de un electrón en una aproximación no-relativista se obtiene como la función propia de la ecuación de Schrödinger $\hat{\mathcal{H}}|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle$, donde $\hat{\mathcal{H}}$ es el hamiltoniano monoelectrónico correspondiente. Para el caso relativista hay que recurrir a la ecuación de Dirac. Las funciones propias mono-electrónicas obtenidas como solución de cualquiera de estas dos ecuaciones se denominan orbitales atómicos, por analogía con la imagen clásica de electrones orbitando alrededor del núcleo. Estos orbitales, en su expresión más básica, se pueden enumerar mediante cuatro números cuánticos: n, l, ml y ms. Obviamente, el principio de exclusión de Pauli implica que no puede haber dos electrones en un mismo átomo con los cuatro valores de los números cuánticos iguales (porque entonces ocuparían el mismo orbital y eso está excluido por el principio).

De acuerdo con la mecánica cuántica, los electrones pueden pasar de un orbital atómico a otro ya sea emitiendo o absorbiendo un cuanto de energía, en forma de fotón. Esta transición de un orbital a otro con diferentes energías explican diversos fenómenos de emisión y absorción de radiación electromagnética por parte de los átomos.

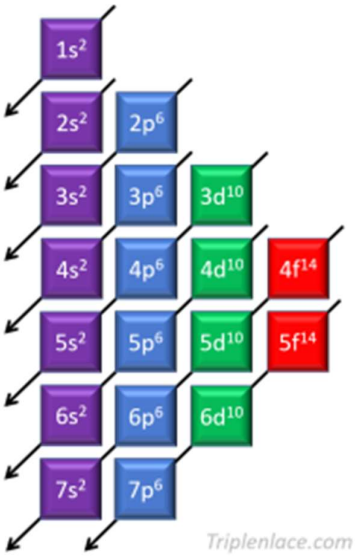
Notación

Se utiliza en una notación estándar para describir las configuraciones electrónicas de átomos y moléculas. En los átomos, la notación contiene la definición de los orbitales atómicos (en la forma n l, por ejemplo 1s, 2p, 3d, 4f) indicando el número de electrones asignado a cada orbital o al (conjunto de orbitales de la misma subcapa) como un superíndice . Por ejemplo, el hidrógeno tiene un electrón en el orbital s de la primera capa, de ahí que su configuración electrónica se escriba 1s1. El litio tiene dos electrones en la subcapa 1s y uno en la subcapa 2s (de mayor energía), de ahí que su configuración electrónica se escriba 1s2 2s1 . Para el fósforo (número atómico 15), tenemos: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^3$.

Para átomos con muchos protones, esta notación puede ser muy larga por lo que se utiliza una notación abreviada, que tiene en cuenta que las primeras subcapas son iguales a las de algún gas noble. Por ejemplo, el fósforo, difiere del argón y neón

($1s^2$ $2s^2$ $2p^6$) únicamente por la presencia de la tercera capa. Así, la configuración electrónica del fósforo se puede escribir respecto de la del neón como: [Ne] $3s^2$ $3p^3$. Esta notación es útil si tenemos en cuenta que la mayor parte de las propiedades químicas de los elementos vienen determinadas por las capas más externas.

El orden en el que se escriben los orbitales viene dado por la estabilidad relativa de los orbitales, escribiéndose primero aquellos que tienen menor energía orbital. Esto significa que, aunque sigue unas pautas generales, se pueden producir excepciones. La mayor parte de los átomos siguen el orden dado por la regla de Madelung. Así, de acuerdo con esta regla, la configuración electrónica del hierro se escribe como: [Ar] $4s^2$ $3d^6$. Otra posible notación agrupa primero los orbitales con el mismo número cuántico n, de tal manera que la configuración del hierro se expresa como [Ar] 3d6 4s2 (agrupando el orbital 3d con los 3s y 3p que están implícitos en la configuración del argón).
El superíndice 1 de los orbitales ocupados por un único electrón no es obligatorio.
Es bastante común ver las letras de los orbitales escritas en letra itálica o cursiva. Sin embargo, la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) recomienda utilizar letra normal, tal y como se realiza aquí.



EXCEPCIONES A LA REGLA DE MADELUNG EN LA CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS

Es habitual predecir la configuración electrónica de un elemento químico de número atómico Z (es decir, Z electrones) sirviéndose del diagrama que se muestra, el cual se basa en la llamada regla (n+ℓ, n), conocida también como regla de Madelung (se explica más abajo). Basta ir «colocando» los Z electrones en las «cajas» siguiendo el orden de las flechas (de derecha a izquierda y de arriba abajo).

Por ejemplo, la configuración electrónica del lantano (Z = 57) deducida del diagrama sería:

1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f1

Pero debe tenerse en cuenta que la configuración real de algunos elementos, es decir, la que se deduce por espectroscopía atómica, no es la que predice el diagrama. Así, el lantano tiene realmente esta configuración:

1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 5d1

La siguiente tabla contiene las configuraciones de todos los elementos que son excepciones a la regla, señalando en rojo en qué parte de la configuración está la discrepancia entre la predicción de la regla de Madelung y los experimentos.

Z	***Elemento***	***Madelung***	***Experimental***
24	Cromo	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d4	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s1 3d5
29	Cobre	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d9	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s1 3d10
41	Niobio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d3	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s1 4d4
42	Molibdeno	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d4	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s1 4d5

44	Rutenio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d6	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s1 4d7
45	Rodio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d7	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s1 4d8
46	Paladio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d8	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 4d10
47	Plata	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d9	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s1 4d10
57	Lantano	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f1	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 5d1
58	Cerio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f2	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d105p6 6s2 4f1 5d1

64	Gadolinio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f8	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f7 5d1
78	Platino	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d8	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s1 4f14 5d9
79	Oro	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d9	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s1 4f14 5d10
89	Actinio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f1	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 6d1
90	Torio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f2	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 6d2

91	Protactinio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f3	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f2 6d1
92	Uranio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f4	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f3 6d1
93	Neptunio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f5	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f4 6d1
96	Curio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f8	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f7 6d1
103	Laurencio	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f14 6d1	1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f14 7p1

Además de los elementos mencionados, es de esperar que algunos otros entre el 105 y el 118 tengan configuraciones distintas de las predichas por la regla de Madelung. (El 104 se adapta a esta regla). Se piensa que pueden presentar

diferencias al menos los elementos 110 y 111. Pero todos estos elementos son radiactivos y tienen un periodo de vida media muy corto, lo que hace muy difícil realizar estudios espectroscópicos para determinar su configuración real. No obstante, se están haciendo predicciones de sus configuraciones mediante cálculos mecanocuánticos.

CONFIGURACIONES DE TODOS LOS ELEMENTOS, COMPLETAS
https://triplenlace.com/2017/09/29/todas-las-configuraciones-electrnicas-de-los-elementos-qumicos-completas/

La regla (n+ℓ, n)

La regla de Madelung (llamada de Klechkowski en Rusia y en países francófonos) indica el orden de «llenado» de los orbitales atómicos cuando se aplica el principio de construcción o Aufbau. Esta regla es:

Se llenan primero los orbitales de menor valor n + ℓ.
Para dos orbitales con el mismo valor n + ℓ, se llena primero el de menor n.
Según dicha regla, el orden de «llenado» de los orbitales es:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p

Ese orden es el que está indicado en el diagrama dibujado más arriba (llamado en algunos países de Moeller, aunque en otros como Brasil se le conoce como de Pauling).

Pero la regla de Madelung, como toda regla, tiene sus excepciones. Se conocen bien las 20 excepciones contenidas en la tabla anterior (10 metales de transición y 10 lantánidos y actínidos). La excepción del lantano, mencionada más arriba, consiste en que, según la regla de Madelung, el último orbital que debería llenarse sería el 5f; sin embargo, es el 5d. Otras excepciones consisten en que, antes de llenarse completamente el orbital que corresponde según el diagrama, se empieza a llenar otro orbital. Por ejemplo, la configuración del cromo predicha por la regla de Madelung sería:

1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d4

Esto significa que el orbital 4s se llena completamente y los cuatro electrones que quedan por colocar entran en el orbital 3d. Sin embargo, lo que ocurre realmente es que, antes de llenarse completamente el 4s, los electrones ocupan posiciones en el 3d.

Las desviaciones de la regla cabe atribuirlas a dos causas:

La especial estabilidad que tienen las subcapas llenas o semillenas. Así, suele ser más estable la configuración d5 que la d4 y la d10 que la d9.
El valor parecido de energía entre orbitales s y d, d y f o d y p.

Origen histórico

Niels Bohr fue el primero en proponer (1923) que la periodicidad en las propiedades de los elementos se podía explicar mediante la estructura electrónica del átomo. Su propuesta se basó en el modelo atómico de Bohr para el átomo, en el cual las capas electrónicas eran órbitas electrónicas a distancias fijas al núcleo. Las configuraciones originales de Bohr hoy parecen extrañas para el químico: al azufre se le asignaba una configuración 2.4.4.6 en vez de $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^4$. = 16= Azufre.

Un año después, E. C. Stoner incorpora el tercer número cuántico de la teoría de Sommerfeld en la descripción de las capas electrónicas, y predice correctamente la estructura de capas del azufre como 2.8.6. Sin embargo, ni el sistema de Bohr ni el de Stoner podían describir correctamente los cambios del espectro atómico en un campo magnético (efecto Zeeman). (efecto stark)

El efecto Zeeman, llamado así por el físico holandés Pieter Zeeman, es el efecto de dividir una línea espectral en varios componentes en presencia de un campo magnético estático. Es análogo al efecto Stark, la división de una línea espectral en varios componentes en presencia de un campo eléctrico. También similar al efecto Stark, las transiciones entre diferentes componentes tienen, en general, diferentes intensidades, algunas de las cuales están totalmente prohibidas (en la aproximación del dipolo), según las reglas de selección.

Dado que la distancia entre los subniveles de Zeeman es una función de la intensidad del campo magnético, este efecto se puede utilizar para medir la intensidad del campo magnético, por ejemplo, la del Sol y otras estrellas o en plasmas de laboratorio. El efecto Zeeman es muy importante en aplicaciones como la espectroscopia de resonancia magnética nuclear, la espectroscopia de resonancia de espín electrónico, la resonancia magnética (RM) y la espectroscopia de Mössbauer. También se puede utilizar para mejorar la precisión en la espectroscopia de absorción atómica. Una teoría sobre el sentido magnético de las aves supone que una proteína en la retina cambia debido al efecto Zeeman. Cuando las líneas espectrales son líneas de absorción, el efecto se llama efecto Zeeman inverso.

El efecto Stark es el desplazamiento y desdoblamiento de las líneas espectrales de los átomos y moléculas debido a la presencia de un campo eléctrico estático. Fue descubierto en 1913 por el físico alemán Johannes Stark (1874–1957) y le valió la

concesión del premio Nobel de Física en 1919. En general se distingue entre el efecto Stark de primer y segundo orden. El efecto de primer orden varía linealmente con la intensidad del campo eléctrico, mientras que el efecto de segundo orden varía cuadráticamente con la intensidad del campo. El efecto Stark explica también el ensanchamiento de las líneas espectrales debido a partículas cargadas. Cuando las líneas desdobladas/desplazadas aparecen en el espectro de absorción, el efecto se llama efecto Stark inverso. El efecto Stark es el análogo eléctrico del efecto Zeeman donde una línea espectral se desdobla en varios componentes debido a la presencia de un campo magnético.

Distribución electrónica

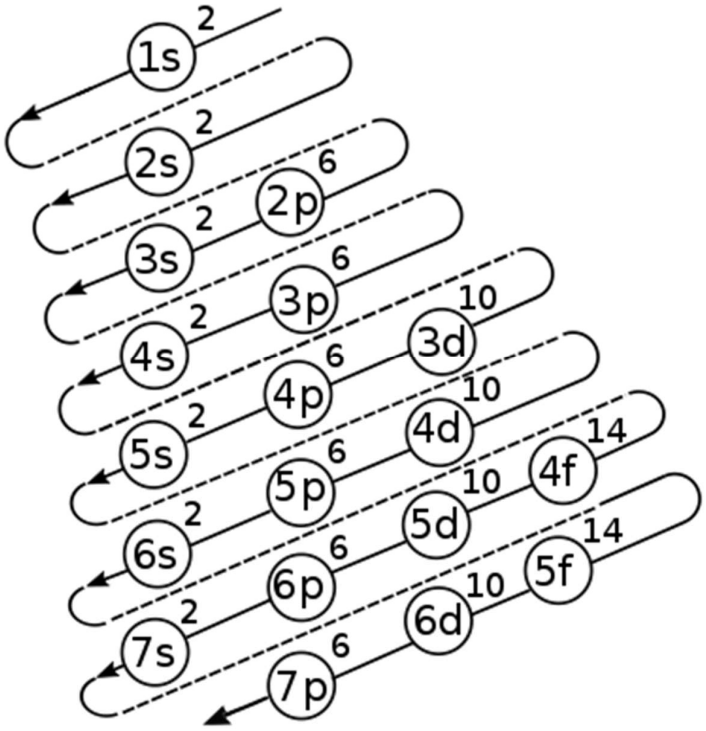


Diagrama de configuración electrónica.

Es la distribución de los electrones en los subniveles y orbitales de un átomo. La configuración electrónica de los elementos se rige según el diagrama de Moeller:

Para comprender el diagrama de Moeller se utiliza la siguiente tabla:

	s	p	d	f
k = 1	1s			
l = 2	2s	2p		
m = 3	3s	3p	3d	
n = 4	4s	4p	4d	4f
o = 5	5s	5p	5d	5f
p = 6	6s	6p	6d	6f
q = 7	7s	7p	7d	7f

Para encontrar la distribución electrónica se escriben las notaciones en forma diagonal desde arriba hacia abajo y de derecha a izquierda (seguir colores):

1s	2s	2p 3s	3p 4s	3d 4p 5s	4d 5p 6s	4f 5d 6p 7s	5f 6d 7p

Este principio de construcción (denominado principio de Aufbau, del alemán Aufbau que significa 'construcción') fue una parte importante del concepto original de Bohr de configuración electrónica. Puede formularse como:

Sólo se pueden ocupar los orbitales con un máximo de dos electrones, en orden creciente de energía orbital: los orbitales de menor energía se llenan antes que los de mayor energía.

Así, vemos que se puede utilizar el orden de energías de los orbitales para describir la estructura electrónica de los átomos de los elementos. Un subnivel s se puede llenar con 1 o 2 electrones. El subnivel p puede contener de 1 a 6 electrones; el subnivel d de 1 a 10 electrones y el subnivel f de 1 a 14 electrones. Ahora es posible describir la estructura electrónica de los átomos estableciendo el subnivel o distribución orbital de los electrones. Los electrones se colocan primero en los subniveles de menor energía y cuando estos están completamente ocupados, se

usa el siguiente subnivel de energía superior. Esto se puede representar por la siguiente tabla:

	s	p	d	f
n = 1	2			
n = 2	2	6		
n = 3	2	6	10	
n = 4	2	6	10	14
n = 5	2	6	10	14
n = 6	2	6	10	
n = 7	2	6		

Para encontrar la configuración electrónica se usa el mismo procedimiento anterior incluyendo esta vez el número máximo de electrones para cada orbital.

$1s^2$	$2s^2$	$2p^6\ 3s^2$	$3p^6\ 4s^2$	$3d^{10}\ 4p^6\ 5s^2$	$4d^{10}\ 5p^6\ 6s^2$	$4f^{14}\ 5d^{10}\ 6p^6\ 7s^2$	$5f^{14}\ 6d^{10}\ 7p^6$

Finalmente la configuración queda de la siguiente manera: 1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d10 4p6 5s2 4d10 5p6 6s2 4f14 5d10 6p6 7s2 5f14 6d10 7p6

Para determinar la configuración electrónica de un elemento, basta con calcular cuántos electrones hay que acomodar y entonces distribuirlos en los subniveles empezando por los de menor energía e ir llenando hasta que todos los electrones estén distribuidos. Un elemento con número atómico mayor tiene un electrón más que el elemento que lo precede. El subnivel de energía aumenta de esta manera:

Subnivel s, p, d o f: Aumenta el nivel de energía.

Sin embargo, existen excepciones, como ocurre en los elementos de transición al ubicarnos en los grupos del cromo y del cobre, en los que se promueve el electrón dando así una configuración fuera de lo común.

Estructura electrónica y tabla periódica de los elementos

Bloques de la tabla periódica de los elementos

La forma de la tabla periódica de los elementos está íntimamente relacionada con la configuración electrónica de los átomos de los elementos. Por ejemplo, todos los elementos del grupo 1 tienen una configuración de [E] ns1 (donde [E] es la configuración del gas inerte correspondiente), y tienen una gran semejanza en sus propiedades químicas. La capa electrónica más externa se denomina "capa de valencia" y (en una primera aproximación) determina las propiedades químicas. Conviene recordar que el hecho de que las propiedades químicas sean similares para los elementos de un grupo fue descubierto hace más de un siglo, antes incluso de aparecer la idea de configuración electrónica. No está claro cómo explica la regla de Madelung (que más bien describe) la tabla periódica, ya que algunas propiedades (tales como el estado de oxidación +2 en la primera fila de los metales de transición) serían diferentes con un orden de llenado de orbitales distinto. Por tanto las configuraciones electrónicas determinarán las propiedades de combinación

Principio de exclusión de Pauli

Esta regla nos dice que en un estado cuántico sólo puede haber un electrón. De aquí salen los valores del espín o giro de los electrones que es 1/2 $\hbar$ y con proyecciones $\pm 1/2$

También que en una orientación deben caber dos electrones excepto cuando el número de electrones se ha acabado, por lo cual el orden que debe seguir este ordenamiento en cada nivel es primero los de espín positivo (+1/2) y luego los negativos.

El principio de exclusión de Pauli fue un principio cuántico enunciado por Wolfgang Ernst Pauli en 1925. Establece que no puede haber dos fermiones con todos sus números cuánticos idénticos (esto es, en el mismo estado cuántico de partícula individual). Perdió la categoría de principio, pues deriva de supuestos más generales: de hecho, es una consecuencia del teorema de la estadística del spin. El principio de exclusión de Pauli sólo se aplica a fermiones, esto es, partículas que forman estados cuánticos antisimétricos y que tienen espín semientero. Son fermiones, por ejemplo, los protones, los neutrones y los electrones, los tres tipos de partículas subatómicas que constituyen la materia ordinaria. El principio de exclusión de Pauli rige, así pues, muchas de las características distintivas de la

materia. En cambio, partículas como el fotón y el (hipotético) gravitón no obedecen a este principio, ya que son bosones, esto es, forman estados cuánticos simétricos y tienen espín entero. Como consecuencia, una multitud de fotones puede estar en un mismo estado cuántico de partícula, como en los láseres. "Dos electrones en la corteza de un átomo no pueden tener al mismo tiempo los mismos números cuánticos". Es sencillo derivar el principio de Pauli, basándonos en el artículo de partículas idénticas. Los fermiones de la misma especie forman sistemas con estados totalmente antisimétricos, lo que para el caso de dos partículas significa que:
mismo estado cuántico |ψ>, el estado del sistema completo es |ψψ>.

Regla del octeto

Para que un átomo sea estable debe tener todos sus orbitales llenos (cada orbital con dos electrones, uno de espín +½ y otro de espín -½) Por ejemplo, el oxígeno, que tiene configuración electrónica $1s^2$, $2s^2$, 2p4, debe llegar a la configuración $1s^2$, $2s^2$, 2p6 con la cual los niveles 1 y 2 estarían llenos. Recordemos que la Regla del octeto, justamente establece que el nivel electrónico se completa con 8 electrones, excepto el hidrógeno, que se completa con 2 electrones. Entonces el oxígeno tendrá la tendencia a ganar los 2 electrones que le faltan, por esto se combina con 2 átomos de hidrógeno (en el caso del agua, por ejemplo), que cada uno necesita 1 electrón (el cual recibe del oxígeno) y otorga a dicho átomo 1 electrón cada uno. De este modo, cada hidrógeno completó el nivel 1 y el oxígeno completó el nivel 2.

En química se denomina orbital a la zona del espacio que rodea a un núcleo atómico donde la probabilidad de encontrar un electrón es máxima, cercana al 91%. Ejemplo de ello: 10 Ne: 1s2, 2s2, 2p6 regla del octeto: 11Na:(Ne)10, 1s2, 2s2, 2p6, 3s1

Anomalías de configuración electrónica

Al desarrollar la configuración electrónica, encontramos una serie de excepciones. Por ejemplo, es más estable llenar dos medios orbitales que completar uno y dejar el otro a uno o dos electrones de estar completado a la mitad. Así, los metales del grupo 6 en vez de tener los orbitales externos completos y el orbital de un electrón de estar semi-completo, donarán un electrón del orbital , quedando ambos completos a la mitad: s1d5 en vez de s2d4. Igualmente, es más estable rellenar los orbitales d completamente, por lo que los elementos- del grupo 11 tenderán a adoptar la configuración s1d10 en vez de s2d9. Ejemplos de estas anomalías son:

Grupo VIB:

24Cr: 1s2, 2s2, 2p6, 3s2, 3p6, 4s2, 3d4 : es incorrecto.

24Cr: 1s2, 2s2, 2p6, 3s2, 3p6, 4s1, 3d5 : es correcto.

Grupo IB:

29Cu: 1s2, 2s2, 2p6, 3s2, 3p6, 3d10, 4s1 : es correcto.

ER: n + l

Donde:
n: nivel l: subnivel

Ejemplo:

4s: 4 + 0 : 4
3p: 3 + 1 : 4
4d: 4 + 2 : 6
5f: 5 + 3 : 8
6g: 6 + 4 : 10
7h: 7 + 5 : 12

Orbital o REEMPE

En química se usa la expresión REEMPE para designar el valor esperado de un operador densidad de estados de dos electrones con {\displaystyle m_{s}=\pm 1/2}. En otras palabras: la región donde existe mayor posibilidad de encontrar como máximo 2 electrones que se mueven en forma paralela y en sentidos contrarios. Su nombre proviene de Región de Espacio Energético de Manifestación Probabilística del Electrón.

Tecnecio
43Tc Tecnecio, Tc, 43

El tecnecio es el más ligero de los elementos químicos que no cuentan con isótopos estables y el primer elemento sintético que se encuentra en la tabla periódica. Su número atómico es el 43 y su símbolo es Tc. Las propiedades químicas de este metal de transición cristalino de color gris plateado son intermedias a las del renio y las del manganeso. Su isómero nuclear 99mTc, de muy corta vida y emisor de rayos gamma, se usa en medicina nuclear para efectuar una amplia variedad de pruebas diagnósticas. El 99Tc se usa como fuente de partículas beta libre de la emisión de rayos gamma. El anión pertecnetato (TcO4-) se emplea como inhibidor de corrosión anódica para aceros.

Antes de que fuera descubierto, muchas de las propiedades del elemento 43 fueron predichas por Dmitri Mendeleev. Mendeleev reservó un espacio en su tabla

periódica para un hipotético elemento que llamó eka - manganeso. En 1937, el isótopo 97Tc se convirtió en el primer elemento producido de forma predominantemente artificial, de ahí su nombre (del griego τεχνητός, que significa "artificial"). La mayoría del tecnecio producido en la Tierra se obtiene como subproducto de la fisión del 235U en los reactores nucleares y se extrae de las varillas de combustible nuclear. Ningún isótopo del tecnecio posee un periodo de semidesintegración mayor de 4,2 millones de años (el caso concreto del 98Tc), así que su detección en gigantes rojas en 1952 ayudó a reforzar la teoría de que en las estrellas pueden generarse elementos pesados. En la Tierra, el tecnecio se encuentra en trazas detectables como producto de la fisión espontánea en minerales de uranio por acción de la captura de neutrones en menas de molibdeno.

Cuestionario:

1.- ¿Qué es configuración electrónica?

2.- Describir el Principio de exclusión de Pauli

3.- Describir el efecto Stark y el efecto Zeeman.

4.- ¿Que diferencia existen entre estos dos fenómenos y que analogía encuentras con el electromagnetismo?

5.- ¿Que es REEMPE?

6.- ¿Que describe la Regla del Octeto?

7.- ¿Que es un Subnivel de energía : s, p, d y f?

Debate 40. Tabla Periódica. Experimento de Franck y Hertz

- El origen de los elementos: de las supernovas a la tabla periódica https://www.youtube.com/watch?v=hdmq404KxUs
- Experimento de Franck-Hertz https://www.youtube.com/watch?v=-3Oe_CkOEmQ

Tabla periódica de los elementos

La tabla periódica de los elementos es una disposición de los elementos químicos en forma de tabla, ordenados por su número atómico (número de protones), por su configuración de electrones y sus propiedades químicas. Este ordenamiento muestra tendencias periódicas, como elementos con comportamiento similar en la misma columna.

En palabras de Theodor Benfey, la tabla y la ley periódica «son el corazón de la química —comparables a la teoría de la evolución en biología, y a las leyes de la termodinámica en la física clásica—».

Las filas de la tabla se denominan períodos y las columnas grupos. Algunos grupos tienen nombres, así por ejemplo el grupo 17 es el de los halógenos y el grupo 18 el de los gases nobles. La tabla también se divide en cuatro bloques con algunas propiedades químicas similares.6 Debido a que las posiciones están ordenadas, se puede utilizar la tabla para obtener relaciones entre las propiedades de los elementos, o pronosticar propiedades de elementos nuevos todavía no descubiertos o sintetizados. La tabla periódica proporciona un marco útil para analizar el comportamiento químico y es ampliamente utilizada en química y otras ciencias.

Dmitri Mendeléyev publicó en 1869 la primera versión de tabla periódica que fue ampliamente reconocida, la desarrolló para ilustrar tendencias periódicas en las propiedades de los elementos entonces conocidos, al ordenar los elementos basándose en sus propiedades químicas, si bien Julius Lothar Meyer, trabajando por separado, llevó a cabo un ordenamiento a partir de las propiedades físicas de los átomos. Mendeléyev también pronosticó algunas propiedades de elementos entonces desconocidos que anticipó que ocuparían los lugares vacíos en su tabla. Posteriormente se demostró que la mayoría de sus predicciones eran correctas cuando se descubrieron los elementos en cuestión.

La tabla periódica de Mendeléyev ha sido desde entonces ampliada y mejorada con el descubrimiento o síntesis de elementos nuevos y el desarrollo de modelos teóricos nuevos para explicar el comportamiento químico. La estructura actual fue diseñada por Alfred Werner a partir de la versión de Mendeléyev. Existen además otros arreglos periódicos de acuerdo a diferentes propiedades y según el uso que se le quiera dar (en didáctica, geología, etc).

Se han descubierto o sintetizado todos los elementos de número atómico del 1 (hidrógeno) al 118 (oganesón); la IUPAC confirmó los elementos 113, 115, 117 y 118 el 30 de diciembre de 2015,10 y sus nombres y símbolos oficiales se hicieron públicos el 28 de noviembre de 2016. Los primeros 94 existen naturalmente, aunque algunos solo se han encontrado en cantidades pequeñas y fueron sintetizados en laboratorio antes de ser encontrados en la naturaleza.n. 1 Los elementos con números atómicos del 95 al 118 solo han sido sintetizados en laboratorios. Allí

también se produjeron numerosos radioisótopos sintéticos de elementos presentes en la naturaleza. Los elementos del 95 a 100 existieron en la naturaleza en tiempos pasados pero actualmente no.11 La investigación para encontrar por síntesis nuevos elementos de números atómicos más altos continúa.

Historia

La historia de la tabla periódica está íntimamente relacionada con varios aspectos del desarrollo de la química y la física:

El descubrimiento de los elementos de la tabla periódica.

El estudio de las propiedades comunes y la clasificación de los elementos.

La noción de masa atómica (inicialmente denominada «peso atómico») y, posteriormente, ya en el siglo xx d. C., número atómico.

Las relaciones entre la masa atómica (y, más adelante, el número atómico) y las propiedades periódicas de los elementos y la aparición de nuevos elementos.

Descubrimiento de los elementos

Aunque algunos elementos como el oro (Au), plata (Ag), cobre (Cu), plomo (Pb) y mercurio (Hg) ya eran conocidos desde la antigüedad, el primer descubrimiento científico de un elemento ocurrió en el siglo xvii d. C., cuando el alquimista Hennig Brand descubrió el fósforo (P). En el siglo xviii d. C. se conocieron numerosos nuevos elementos, los más importantes de los cuales fueron los gases, con el desarrollo de la química neumática: oxígeno (O), hidrógeno (H) y nitrógeno (N). También se consolidó en esos años la nueva concepción de elemento, que condujo a Antoine Lavoisier a escribir su famosa lista de sustancias simples, donde aparecían 33 elementos. A principios del siglo xix d. C., la aplicación de la pila eléctrica al estudio de fenómenos químicos condujo al descubrimiento de nuevos elementos, como los metales alcalinos y alcalino-térreos, sobre todo gracias a los trabajos de Humphry Davy. En 1830 ya se conocían 55 elementos. Posteriormente, a mediados del siglo xix d. C., con la invención del espectroscopio, se descubrieron nuevos elementos, muchos de ellos nombrados por el color de sus líneas espectrales características: cesio (Cs, del latín caesĭus, azul), talio (Tl, de tallo, por su color verde), rubidio (Rb, rojo), etc. Durante el siglo xx d. C., la investigación en los procesos radioactivos llevó al descubrimiento en cascada de una serie de elementos pesados (casi siempre sustancias artificiales sintetizadas en laboratorio, con periodos de vida estable muy cortos), hasta alcanzar la cifra de 118 elementos con denominación oficialmente aceptados por la IUPAC en noviembre de 2016.

Noción de elemento y propiedades periódicas

Lógicamente, un requisito previo necesario a la construcción de la tabla periódica era el descubrimiento de un número suficiente de elementos individuales, que hiciera posible encontrar alguna pauta en comportamiento químico y sus propiedades. Durante los siguientes dos siglos se fue adquiriendo un mayor conocimiento sobre estas propiedades, así como descubriendo muchos elementos nuevos.

La palabra «elemento» procede de la ciencia griega, pero su noción moderna apareció a lo largo del siglo xvii d. C., aunque no existe un consenso claro respecto al proceso que condujo a su consolidación y uso generalizado. Algunos autores citan como precedente la frase de Robert Boyle en su famosa obra El químico escéptico, donde denomina elementos «ciertos cuerpos primitivos y simples que no están formados por otros cuerpos, ni unos de otros, y que son los ingredientes de que se componen inmediatamente y en que se resuelven en último término todos los cuerpos perfectamente mixtos». En realidad, esa frase aparece en el contexto de la crítica de Robert Boyle a los cuatro elementos aristotélicos.

A lo largo del siglo xviii d. C., las tablas de afinidad recogieron un nuevo modo de entender la composición química, que aparece claramente expuesto por Lavoisier en su obra Tratado elemental de química. Todo ello condujo a diferenciar en primer lugar qué sustancias de las conocidas hasta ese momento eran elementos químicos, cuáles eran sus propiedades y cómo aislarlas.

El descubrimiento de gran cantidad de elementos nuevos, así como el estudio de sus propiedades, pusieron de manifiesto algunas semejanzas entre ellos, lo que aumentó el interés de los químicos por buscar algún tipo de clasificación.

Los pesos atómicos

A principios del siglo xix d. C., John Dalton (1766-1844) desarrolló una concepción nueva del atomismo, a la que llegó gracias a sus estudios meteorológicos y de los gases de la atmósfera. Su principal aportación consistió en la formulación de un «atomismo químico» que permitía integrar la nueva definición de elemento realizada por Antoine Lavoisier (1743-1794) y las leyes ponderales de la química (proporciones definidas, proporciones múltiples, proporciones recíprocas).

Dalton empleó los conocimientos sobre proporciones en las que reaccionaban las sustancias de su época y realizó algunas suposiciones sobre el modo como se combinaban los átomos de las mismas. Estableció como unidad de referencia la masa de un átomo de hidrógeno (aunque se sugirieron otros en esos años) y refirió el resto de los valores a esta unidad, por lo que pudo construir un sistema de masas atómicas relativas. Por ejemplo, en el caso del oxígeno, Dalton partió de la suposición de que el agua era un compuesto binario, formado por un átomo de hidrógeno y otro de oxígeno. No tenía ningún modo de comprobar este punto, por lo que tuvo que aceptar esta posibilidad como una hipótesis a priori.

Dalton sabía que una parte de hidrógeno se combinaba con siete partes (ocho, afirmaríamos en la actualidad) de oxígeno para producir agua. Por lo tanto, si la combinación se producía átomo a átomo, es decir, un átomo de hidrógeno se combinaba con un átomo de oxígeno, la relación entre las masas de estos átomos debía ser 1:7 (o 1:8 se calcularía en la actualidad). El resultado fue la primera tabla de masas atómicas relativas (o pesos atómicos, como los llamaba Dalton), que fue posteriormente modificada y desarrollada en los años posteriores. Las inexactitudes antes mencionadas dieron lugar a toda una serie de polémicas y disparidades respecto a las fórmulas y los pesos atómicos, que solo comenzarían a superarse, aunque no totalmente, en el congreso de Karlsruhe en 1860.

Tabla periódica de Mendeléyev

Tabla de Mendeléyev publicada en 1872. En ella deja casillas libres para los elementos por descubrir.

En 1869, el profesor de química ruso Dmitri Ivánovich Mendeléyev publicó su primera Tabla Periódica en Alemania. Un año después Julius Lothar Meyer publicó una versión ampliada de la tabla que había creado en 1864, basadas en la periodicidad de los volúmenes atómicos en función de la masa atómica de los elementos.

Por esta fecha ya eran conocidos 63 elementos de los 92 que existen de forma natural entre el Hidrógeno y el Uranio. Ambos químicos colocaron los elementos por

orden creciente de sus masas atómicas, los agruparon en filas o periodos de distinta longitud y situaron en el mismo grupo elementos que tenían propiedades químicas similares, como la valencia. Construyeron sus tablas haciendo una lista de los elementos en filas o columnas en función de su peso atómico y comenzando una nueva fila o columna cuando las características de los elementos comenzaron a repetirse.

El reconocimiento y la aceptación otorgada a la tabla de Mendeléyev vino a partir de dos decisiones que tomó. La primera fue dejar huecos cuando parecía que el elemento correspondiente todavía no había sido descubierto. No fue el primero en hacerlo, pero sí en ser reconocido en el uso de las tendencias en su tabla periódica para predecir las propiedades de esos elementos faltantes.38 Incluso pronosticó las propiedades de algunos de ellos: el galio (Ga), al que llamó eka-aluminio por estar situado debajo del aluminio; el germanio (Ge), al que llamó eka-silicio; el escandio (Sc); y el tecnecio (Tc), que, aislado químicamente a partir de restos de un sincrotrón en 1937, se convirtió en el primer elemento producido de forma predominantemente artificial.

La segunda decisión fue ignorar el orden sugerido por los pesos atómicos y cambiar los elementos adyacentes, tales como telurio y yodo, para clasificarlos mejor en familias químicas. En 1913, Henry Moseley determinó los valores experimentales de la carga nuclear o número atómico de cada elemento, y demostró que el orden de Mendeléyev corresponde efectivamente al que se obtiene de aumentar el número atómico.

El significado de estos números en la organización de la tabla periódica no fue apreciado hasta que se entendió la existencia y las propiedades de los protones y los neutrones. Las tablas periódicas de Mendeléyev utilizan el peso atómico en lugar del número atómico para organizar los elementos, información determinable con precisión en ese tiempo. El peso atómico funcionó bastante bien para la mayoría de los casos permitiendo predecir las propiedades de los elementos que faltan con mayor precisión que cualquier otro método conocido entonces. Moseley predijo que los únicos elementos que faltaban entre aluminio (Z = 13) y oro (Z = 79) eran Z = 43, 61, 72 y 75, que fueron descubiertos más tarde. La secuencia de números atómicos todavía se utiliza hoy en día incluso aunque se han descubierto y sintetizado nuevos elementos.

Segunda tabla periódica de Mendeléyev y desarrollos posteriores

I R2O	II RO	III R2O3	IV RH4 RO3	V RH3 R2O5	VI RH2 RO3	VII RH R2O7	VIII RO4
H							
Li	Be	B	C	N	O	F	
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	
K Cu	Ca Zn		Ti	V As	Cr Se	Mn Br	Fe Co Ni
Rb Ag	Sr Cd	Y In	Zr Sn	Nb Sb	Mo Te	 I	Ru Rh Pd
Cs Au	Ba Hg	La Tl	Hf Pb	Ta Bi	W		Os Ir Pt

Tabla periódica de Mendeléyev de 1871 con 8 grupos de elementos. Los guiones representan elementos desconocidos en esa fecha

En 1871, Mendeléyev publicó su tabla periódica en una nueva forma, con grupos de elementos similares dispuestos en columnas en lugar de filas, numeradas I a VIII en correlación con el estado de oxidación del elemento. También hizo predicciones detalladas de las propiedades de los elementos que ya había señalado que faltaban, pero deberían existir. Estas lagunas se llenaron posteriormente cuando los químicos descubrieron elementos naturales adicionales.

En su nueva tabla consigna el criterio de ordenación de las columnas se basan en los hidruros y óxidos que puede formar esos elementos y por tanto, implícitamente, las valencias de esos elementos. Aún seguía dando resultados contradictorios (Plata y Oro aparecen duplicados, y no hay separación entre Berilio y Magnesio con Boro y Aluminio), pero significó un gran avance. Esta tabla fue completada con un grupo más, constituido por los gases nobles descubiertos en vida de Mendeléyev, pero que, por sus características, no tenían cabida en la tabla, por lo que hubo de esperar casi treinta años, hasta 1904, con el grupo o valencia cero, quedando la tabla más completa.

A menudo se afirma que el último elemento natural en ser descubierto fue el francio —designado por Mendeléyev como eka-cesio— en 1939. Sin embargo, el plutonio, producido sintéticamente en 1940, fue identificado en cantidades ínfimas como un elemento primordial de origen natural en 1971.

La disposición de la tabla periódica estándar es atribuible a Horace Groves Deming, un químico americano que en 1923 publicó una tabla periódica de 18 columnas. En 1928 Merck and Company preparó un folleto con esta tabla, que fue ampliamente difundida en las escuelas estadounidenses. Por la década de 1930 estaba apareciendo en manuales y enciclopedias de química. También se distribuyó durante muchos años por la empresa Sargent-Welch Scientific Company.

Mecánica cuántica y expansión progresiva de la tabla

La tabla periódica de Mendeléyev presentaba ciertas irregularidades y problemas. En las décadas posteriores tuvo que integrar los descubrimientos de los gases nobles, las «tierras raras» y los elementos radioactivos. Otro problema adicional eran las irregularidades que existían para compaginar el criterio de ordenación por peso atómico creciente y la agrupación por familias con propiedades químicas comunes. Ejemplos de esta dificultad se encuentran en las parejas telurio-yodo, argón-potasio y cobalto-níquel, en las que se hace necesario alterar el criterio de pesos atómicos crecientes en favor de la agrupación en familias con propiedades químicas semejantes.

Durante algún tiempo, esta cuestión no pudo resolverse satisfactoriamente hasta que Henry Moseley (1867-1919) realizó un estudio sobre los espectros de rayos X en 1913. Moseley comprobó que al representar la raíz cuadrada de la frecuencia de la radiación en función del número de orden en el sistema periódico se obtenía una recta, lo cual permitía pensar que este orden no era casual sino reflejo de alguna propiedad de la estructura atómica. Hoy sabemos que esa propiedad es el número atómico (Z) o número de cargas positivas del núcleo.

La explicación que se acepta actualmente de la ley periódica surgió tras los desarrollos teóricos producidos en el primer tercio del siglo XX, cuando se construyó la teoría de la mecánica cuántica. Gracias a estas investigaciones y a desarrollos posteriores, se acepta que la ordenación de los elementos en el sistema periódico está relacionada con la estructura electrónica de los átomos de los diversos elementos, a partir de la cual se pueden predecir sus diferentes propiedades químicas.

En 1945 Glenn Seaborg, un científico estadounidense, sugirió que los actínidos, como los lantánidos, estaban llenando un subnivel f en vez de una cuarta fila en el bloque d, como se pensaba hasta el momento. Los colegas de Seaborg le aconsejaron no publicar una teoría tan radical, ya que lo más probable era arruinar su carrera. Como consideraba que entonces no tenía una carrera que pudiera caer en descrédito, la publicó de todos modos. Posteriormente se encontró que estaba en lo cierto y en 1951 ganó el Premio Nobel de Química por su trabajo en la síntesis de los actínidos.

En 1952, el científico costarricense Gil Chaverri presentó una nueva versión basada en la estructura electrónica de los elementos, la cual permite ubicar las series de lantánidos y actínidos en una secuencia lógica de acuerdo con su número atómico.

Aunque se producen de forma natural pequeñas cantidades de algunos elementos transuránicos,11 todos ellos fueron descubiertos por primera vez en laboratorios, el primero de los cuales fue el neptunio, sintetizado en 1939. La producción de estos elementos ha expandido significativamente la tabla periódica.55 Debido a que

muchos son altamente inestables y decaen rápidamente, son difíciles de detectar y caracterizar cuando se producen. Han existido controversias relativas a la aceptación de las pretensiones y derechos de descubrimiento de algunos elementos, lo que requiere una revisión independiente para determinar cuál de las partes tiene prioridad, y por lo tanto los derechos del nombre. Flerovio (elemento 114) y livermorio (elemento 116) fueron nombrados el 31 de mayo de 2012. En 2010, una colaboración conjunta entre Rusia y Estados Unidos en Dubná, región de Moscú, Rusia, afirmó haber sintetizado seis átomos de teneso (elemento 117).

El 30 de diciembre de 2015 la IUPAC reconoció oficialmente los elementos 113, 115, 117, y 118, completando la séptima fila de la tabla periódica.58 El 28 de noviembre de 2016 se anunciaron los nombres oficiales y los símbolos de los últimos cuatro nuevos elementos aprobados hasta la fecha por la IUPAC (Nh, nihonio; Mc, moscovio; Ts, teneso; y Og, oganesón),1 que sustituyen a las designaciones temporales.

Estructura y organización de la tabla periódica

La tabla periódica actual es un sistema donde se clasifican los elementos conocidos hasta la fecha. Se colocan de izquierda a derecha y de arriba a abajo en orden creciente de sus números atómicos. Los elementos están ordenados en siete hileras horizontales llamadas periodos, y en 18 columnas verticales llamadas grupos o familias.

Hacia abajo y a la izquierda aumenta el radio atómico y el radio iónico.
Hacia arriba y a la derecha aumenta la energía de ionización, la afinidad electrónica y la electronegatividad.

El experimento de Franck y Hertz se realizó por primera vez en 1914 por James Franck y Gustav Ludwig Hertz. Tiene por objeto probar la cuantización de los niveles de energía de los electrones en los átomos. El experimento confirmó el modelo cuántico del átomo de Bohr demostrando que los átomos solamente podían absorber cantidades específicas de energía (cuantos). Por ello, este experimento es uno de los experimentos fundamentales de la física cuántica. Por este experimento Franck y Hertz recibieron el premio Nobel de física en 1925.

En 1913, Niels Bohr propuso un nuevo modelo del átomo, (átomo de Bohr), y de órbitas de los electrones, que se basaba en el modelo del átomo de Rutherford (análogo a un sistema planetario). Su modelo tenía cuatro postulados, uno de ellos era relativo a la cuantización de las órbitas de los electrones. Así, los primeros experimentos consistían en poner en evidencia esta cuantización. Estos primeros experimentos usaban la luz, y a la época se sabía que esta estaba formada por "cuantos de energía". Por ello, se reprochaba a Bohr que los resultados de la cuantización de las órbitas (y por tanto la cuantización de los estados de energía de los electrones del átomo) se debían sólo a la cuantización de la luz. En 1914, Franck y Hertz, que trabajaban en las energías de ionización de los átomos, pusieron a punto una experiencia que usaba los niveles de energía del átomo de mercurio. Su experiencia sólo usaba electrones y átomos de mercurio, sin hacer uso de ninguna luz. Bohr encontró así la prueba irrefutable de su modelo atómico.

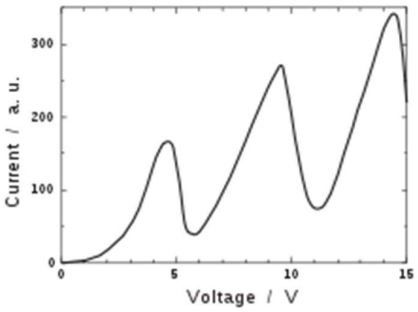
El experimento de Franck y Hertz

Principio: Con el fin de poner en evidencia la cuantización de los niveles de energía, utilizamos un triodo, (El triodo, del griego τρίοδος, triodos, de tri (tres) y hodós (vías), es una válvula electrónica de amplificación que consta de tres electrodos dispuestos en el interior de una envoltura de vidrio en la que se ha hecho el vacío: un filamento calentado o cátodo, una rejilla, y una placa o ánodo. Su invención dio inicio a la era de la electrónica, lo que hizo posible la tecnología de radio amplificada, la telefonía de larga distancia y la televisión. Los triodos fueron ampliamente utilizados en dispositivos electrónicos de consumo tales como radios y televisores hasta la década de 1960, cuando los transistores los reemplazaron.) compuesto de un cátodo, de una rejilla polarizada y de un ánodo, que crea un haz de electrones en un tubo de vacío que contiene mercurio gaseoso. Medimos entonces la variación de la corriente recibida por el ánodo con arreglo a la energía cinética de los electrones, y podemos deducir las pérdidas de energía de los electrones en el momento de las colisiones.

Material

El conjunto del triodo está contenido dentro de una cápsula de vidrio que contiene mercurio. El experimento puede realizarse a diferentes temperaturas y es interesante comparar estos resultados con una medida a temperatura ambiente (el mercurio está entonces en el estado líquido). Una vez calentado a 630 K, el mercurio se vuelve gaseoso. Pero para evitar tener que alcanzar tal temperatura, se trabaja a una presión reducida dentro de la cápsula y se calienta entre 100 y 200 °C. Para que los electrones sean arrancados y para que tengan una velocidad bastante importante, utilizamos una tensión entre el cátodo y la rejilla, una tensión de aceleración. Igualmente, puede ser interesante introducir una tensión sentido opuesto, entre el ánodo y la rejilla con el fin de frenar los electrones.

Los resultados del experimento



Corriente frente a voltaje.

Como resultado de esta experiencia, nos es posible representar la evolución de la diferencia de potencial que resulta de un convertidor de corriente - tensión (dispuesto a la salida del ánodo) con respecto a la diferencia de potencial de extracción de los electrones (desde el cátodo).

Para diferencias de potencial bajas - hasta 4,9 V - la corriente a través del tubo aumenta constantemente con el aumento de la diferencia potencial. Con el voltaje más alto aumenta el campo eléctrico en el tubo y los electrones fueron empujados con más fuerza hacia la rejilla de aceleración.

A los 4,9 voltios la corriente cae repentinamente, casi de nuevo a cero.
La corriente aumenta constantemente de nuevo si el voltaje se sigue aumentando, hasta que se alcanzan 9.8 voltios (exactamente 4.9+4.9 voltios).
En 9.8 voltios se observa una caída repentina similar.

Esta serie de caídas en la corriente para incrementos de aproximadamente 4.9 voltios continuará visiblemente hasta potenciales de por lo menos 100 voltios.

Interpretación de los resultados

Franck y Hertz podían explicar su experimento en términos de colisión elástica y colisión inelástica de los electrones. Para potenciales bajos, los electrones acelerados adquirieron solamente una cantidad modesta de energía cinética. Cuando se encontraron con los átomos del mercurio en el tubo, participaron en colisiones puramente elásticas. Esto se debe a la predicción de la mecánica cuántica que un átomo no puede absorber ninguna energía hasta que la energía de la colisión exceda el valor requerido para excitar un electrón que esté enlazado a tal átomo a un estado de una energía más alta.

Con las colisiones puramente elásticas, la cantidad total de energía cinética en el sistema sigue siendo igual. Puesto que los electrones son unas mil veces menos masivos que los átomos más ligeros, esto significa que la mayoría de los electrones mantuvieron su energía cinética. Los potenciales más altos sirvieron para conducir más electrones a la rejilla al ánodo y para aumentar la corriente observada, hasta que el potencial de aceleración alcanzó 4.9 voltios.

La energía de excitación electrónica más baja que un átomo del mercurio puede tener requiere 4,9 electronvoltios (eV). Cuando el potencial de aceleración alcanzó 4.9 voltios, cada electrón libre poseyó exactamente 4.9 eV de energía cinética (sobre su energía en reposo a esa temperatura) cuando alcanzó la rejilla. Por lo tanto, una colisión entre un átomo del mercurio y un electrón libre podía ser inelástica en ese punto: es decir, la energía cinética de un electrón libre se podía

convertir en energía potencial excitando el nivel de energía de un electrón de un átomo de mercurio. Con la pérdida de toda su energía cinética, el electrón libre no puede superar el potencial negativo leve en el electrodo a tierra, y la corriente eléctrica cae fuertemente.

Al aumentar el voltaje, los electrones participan en una colisión inelástica, pierden su eV 4.9, pero después continúan siendo acelerados. De este modo, la corriente medida sube otra vez al aumentar el potencial de aceleración a partir de 4.9 V. A los 9.8 V, la situación cambia otra vez. Allí, cada electrón ahora tiene energía suficiente para participar en dos colisiones inelásticas, excitando dos átomos de mercurio, para después quedarse sin energía cinética. Ello explica las caídas de corriente observadas. En los intervalos de 4.9 voltios este proceso se repetirá pues los electrones experimentarán una colisión inelástica adicional.

Cuestionario:

1.- ¿Que describe el Experimento de Franck-Hertz

2.- ¿Cuál es el número cuántico principal?

3.- ¿Por qué un microscopio electrónico brinda una mayor ampliación que un microscopio ordinario?

4.- ¿Que es un peso atómico?

5.- ¿Qué entiendes cómo colisión elástica y colisión inelástica de los electrones?

6.- Qué es y cómo funciona un triodo?

Debate 41. Efecto Zeeman. Efecto Stark

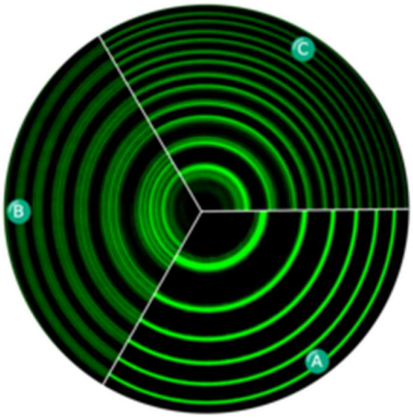
- Efecto Zeeman
  https://www.youtube.com/watch?v=mbONVH4INpk

- Efecto Stark
  https://www.youtube.com/watch?v=BXg_jWZivo0

- Interacción espin- orbita
  https://www.youtube.com/watch?v=n9dD5NumwIE

- La ciencia y la física cuántica nos ayudan a entender el universo.
  https://www.youtube.com/watch?v=hsLcAQ87TEE&t=1s

Efecto Zeeman



Las líneas espectrales de la lámpara de vapor de mercurio en la longitud de onda 546.1 nm, mostrando un efecto Zeeman anómalo. (A) Sin campo magnético. (B) Con el campo magnético, las líneas espectrales se dividen como un efecto Zeeman transversal. (C) Con campo magnético, dividido como efecto Zeeman longitudinal. Las líneas espectrales se obtuvieron mediante un interferómetro de Fabry-Pérot.

El efecto Zeeman, que lleva el nombre del físico neerlandés Pieter Zeeman, es el efecto de la división de una línea espectral en varios componentes en presencia de un campo magnético estático. Es análogo al efecto Stark, la división de una línea espectral en varios componentes en presencia de un campo eléctrico. También similar al efecto Stark, las transiciones entre diferentes componentes tienen, en general, diferentes intensidades, estando algunas totalmente prohibidas (en la aproximación dipolar), según se rige por las reglas de selección. Dado que la distancia entre los subniveles de Zeeman es una función de la intensidad del campo magnético, este efecto se puede utilizar para medir la intensidad del campo magnético, por ejemplo, el del Sol y otras estrellas o en plasmas de laboratorio. El efecto Zeeman es muy importante en aplicaciones como la espectroscopia de resonancia magnética nuclear, la espectroscopia de resonancia de espín electrónico, la formación de imágenes por resonancia magnética (MRI) y la espectroscopia de Mössbauer. También se puede utilizar para mejorar la precisión en la espectroscopia de absorción atómica. Una teoría sobre el sentido magnético de las aves asume que una proteína en la retina cambia debido al efecto Zeeman. Cuando las líneas espectrales son líneas de absorción, el efecto se denomina efecto Zeeman inverso.

Nomenclatura

Históricamente, se distingue entre el efecto Zeeman normal y anómalo (descubierto por Thomas Preston en Dublín, Irlanda). El efecto anómalo aparece en las transiciones en las que el spin neto de los electrones no es cero. Se le llamó "anómalo" porque el espín del electrón aún no se había descubierto, por lo que no había una buena explicación en el momento en que Zeeman observó el efecto. A mayor intensidad de campo magnético, el efecto deja de ser lineal. A una fuerza de campo aún mayor, cuando la fuerza del campo externo es comparable a la fuerza del campo interno del átomo, el acoplamiento de electrones se altera y las líneas espectrales se reorganizan. Esto se llama efecto Paschen-Back.

http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/quantum/paschen.html

En la literatura científica moderna, estos términos se utilizan raramente, con una tendencia a utilizar solo "efecto Zeeman".

El efecto Paschen-Back es la división de los niveles de energía atómica en presencia de un fuerte campo magnético. Esto ocurre cuando un campo magnético externo es lo suficientemente fuerte como para interrumpir el acoplamiento entre orbitales ($\vec{L}$) y girar ($\vec{S}$) momentos angulares. Este efecto es el límite de campo fuerte del efecto Zeeman. Cuando $s = 0$, los dos efectos son equivalentes. El efecto lleva el nombre de los físicos alemanes Friedrich Pascheny Ernst E. A. Back. Cuando la perturbación del campo magnético excede significativamente la interacción espín-órbita, se puede asumir con seguridad $[H_0, S] = 0$. Esto permite que los valores esperados de L_z y S_z para ser fácilmente evaluado por un estado $|\psi\rangle$. Las energías son simplemente

$$E_z = \left\langle \psi \left| H_0 + \frac{B_z \mu_\mathrm{B}}{\hbar}(L_z + g_s S_z) \right| \psi \right\rangle = E_0 + B_z \mu_\mathrm{B}(m_l + g_s m_s).$$

Lo anterior puede interpretarse como implicando que el acoplamiento LS está completamente roto por el campo externo. Sin embargo m_l y m_s siguen siendo números cuánticos "buenos". Junto con las reglas de selección para una transición de dipolo eléctrico, es decir, $\Delta s = 0, \Delta m_s = 0, \Delta l = \pm 1, \Delta m_l = 0, \pm 1$ esto permite ignorar por completo el grado de libertad de giro. Como resultado, solo tres líneas espectrales serán visibles, correspondientes a la $\Delta m_l = 0, \pm 1$ regla de selección. La división $\Delta E = B\mu_\mathrm{B}\Delta m_l$ es independiente de las energías no perturbadas y las configuraciones electrónicas de los niveles considerados. En general (si $s \neq 0$), estos tres componentes son en realidad grupos de varias transiciones cada uno, debido al acoplamiento de espín-órbita residual.

En general, ahora se debe agregar el acoplamiento de espín-órbita y las correcciones relativistas (que son del mismo orden, conocidas como "estructura fina") como una perturbación a estos niveles "imperturbables". La teoría de perturbación de primer orden con estas correcciones de estructura fina produce la siguiente fórmula para el átomo de hidrógeno en el límite de Paschen – Back:

El efecto Stark es el desplazamiento y desdoblamiento de las líneas espectrales de los átomos y moléculas debido a la presencia de un campo eléctrico estático. Fue descubierto en 1913 por el físico alemán Johannes Stark (1874–1957) y le valió la concesión del premio Nobel de Física en 1919.

En general se distingue entre el efecto Stark de primer y segundo orden. El efecto de primer orden varía linealmente con la intensidad del campo eléctrico, mientras que el efecto de segundo orden varía cuadráticamente con la intensidad del campo.

El efecto Stark explica también el ensanchamiento de las líneas espectrales debido a partículas cargadas. Cuando las líneas desdobladas/desplazadas aparecen en el espectro de absorción, el efecto se llama efecto Stark inverso.

El efecto Stark es el análogo eléctrico del efecto Zeeman donde una línea espectral se desdobla en varios componentes debido a la presencia de un campo magnético.

Acoplamiento de momento angular

En mecánica cuántica, el procedimiento de construir estados propios del momento angular total (estados de un sistema con valores bien definidos del momento angular) a partir de los estados propios de los momentos angulares individuales se llama acoplamiento de momentos angulares. Se utiliza cuando, a causa de una interacción física entre dos momentos angulares, estos ya no son constantes del movimiento independientes (sus valores individuales ya no siguen leyes de conservación), pero la suma de los dos momentos angulares normalmente sí lo es. Por ejemplo, el espín y el movimiento de un electrón pueden interaccionar por acoplamiento espín-órbita, en cuyo caso es útil acoplar sus momentos angulares orbital y de espín. O dos partículas cargadas, cada una con un momento angular bien definido, pueden interaccionar por fuerzas de Coulomb, y entonces es útil acoplar los momentos angulares de cada partícula resultando en un momento angular total, como paso para la resolución de la ecuación de Schrödinger de dos partículas. El acoplamiento de momentos angulares en átomos es importante para explicar experimentos de espectroscopia atómica. El acoplamiento de momentos angulares de espines electrónicos es de importancia en la parte de la química cuántica que estudia la magnetoquímica, y en la parte de la física cuántica que estudia la física de la materia condensada. En astronomía, el acoplamiento de momentos angulares refleja la ley general de conservación del momento angular

que también es válida en objetos celestes. En casos simples, la dirección del vector momento angular se desprecia, y el acoplamiento espín-órbita es la razón entre la frecuencia con la que un planeta u otro cuerpo celeste rota sobre su propio eje y aquella con la que orbita alrededor de otro cuerpo. Esto se conoce comúnmente como resonancia orbital. Frecuentemente, los efectos físicos subyacentes son las fuerzas de marea.

Teoría general y detalles del origen

El momento angular es una propiedad de los sistemas físicos, y es una constante de movimiento (propiedad conservada, independiente del tiempo y bien definida) en dos situaciones: (i) El sistema está sujeto a un campo potencial de simetría esférica. (ii) El sistema se mueve -en sentido mecanocuántico- en el espacio isótropo. En ambos casos el operador del momento angular conmuta con el hamiltoniano del sistema. Por el principio de indeterminación de Heisenberg esto significa que el valor del momento angular y el de la energía del sistema pueden tener valores arbitrariamente precisos simultáneamente.

Un ejemplo de la primera situación es un átomo cuyos electrones sólo estén expuestos al campo culombiano de su núcleo. En este modelo, el Hamiltoniano atómico es la suma de las energías cinéticas de los electrones y de las interacciones electrón-núcleo, de simetría esférica. Así, despreciando la interacción interelectrónica (y otras perturbaciones menores como el acoplamiento espín-órbita), el momento angular orbital l de cada electrón conmuta con el del Hamiltoniano total.

Un ejemplo de la segunda situación es un rotor rígido moviéndose en un espacio libre de campos. Un rotor rígido tiene un momento angular bien definido e independiente del tiempo.

Estas dos situaciones se originan en la mecánica clásica. Un tercer tipo de momento angular conservado, asociado con la magnitud cuántica del espín, no tiene análogo clásico. Sin embargo, todas las reglas del acoplamiento de momentos angulares se aplican también al espín.

En general, la conservación del momento angular implica simetría rotacional completa (descrita por los grupos de simetría SO(3) y SU(2)), y vicecersa. Si dos o más sistemas físicos tienen conservación de sus momentos angulares por separado, puede ser útil sumar estos momentos en un momento angular total, que será una propiedad conservada del sistema combinado. La construcción de estados propios del momento angular total a partir de los estados propios de los momentos angulares de los subsistemas individuales se denomina acoplamiento del momento angular.

La aplicación del acoplamiento del momento angular es útil cuando hay una interacción entre subsistemas que, sin ella, tendrían momentos angulares conservados. La interacción rompe la simetría esférica de los subsistemas, pero el momento angular total sigue siendo una constante del movimiento, lo que resulta de utilidad para resolver la ecuación de Schrödinger. En mecánica cuántica, este tipo de acoplamiento también se produce entre momentos angulares pertenecientes a distintos espacios de Hilbert de un mismo objeto, por ejemplo su espín y su momento magnético orbital.

Acoplamiento espín-órbita

El comportamiento de las partículas subatómicas está bien descrito por la teoría de la mecánica cuántica, en la cual cada partícula tiene un momento angular intrínseco llamado espín, y donde las configuraciones específicas -por ejemplo de electrones en un átomo- se describen por una serie de números cuánticos. Los colectivos de partículas también tienen momentos angulares y los correspondientes números cuánticos, y bajo diferentes condiciones los momentos angulares de las partes se suman en diferentes formas resultando en diferentes momentos angulares globales. La interacción espín-órbita es la interacción entre un momento magnético asociado al espín con su movimiento espacial bajo un potencial (generalmente de origen electrostático).

En física atómica, el acoplamiento espín-órbita describe una interacción del momento magnético asociado al espín de los electrones y de su movimiento orbital alrededor del núcleo. El efecto se presenta en el espectro del átomo o la molécula, donde las líneas espectrales que coincidían se separan. Las líneas espectrales están asociadas a niveles de energía del sistema. En el caso donde niveles de energía parecen coincidir, por ejemplo tienen la misma energía si el electrón tenía el espín alineado o antialineado con el momento angular orbital, ahora se separan un poco debido a la interacción espín-órbita que prefiere una alineación sobre la otra.

Esta interacción es responsable de muchos detalles de la estructura atómica y molecular. Comúnmente, lo encontramos cuando en un ion, un átomo o una molécula, además de electrones desparejados (que aportan momento magnético de espín) tenemos una configuración electrónica con degeneración orbital. En estos casos, coexisten la interacción electrostática (repulsión de Coulomb) con efectos electromagnéticos relativistas (interacción espín-órbita).

En física del estado sólido, la diferencia entre bandas de energía dada por acoplamiento espín-orbita es observado cuando el momento magnético asociado a los portadores de carga en un sólido interactúa con el campo electrostático de la red cristalina debido al movimiento relativo entre los portadores y los iones. Este fenómeno es remarcable cuando la red carece de ciertas simetrías, por ejemplo el effecto espín-órbita de Dresselhaus aparece en sistemas macizos sin simetría de

inversión. Otro ejemplo son los llamados puntos cuánticos (también llamados átomos artificiales) donde la interacción aparece debido a las restricciones de movimiento sobre un espacio pequeño.

En el mundo macroscópico de la mecánica orbital de astros, el término acoplamiento espín-órbita se usa a veces en el mismo sentido que resonancia espín-órbita.

Generalmente, se calcula usando la teoría perturbacional: se supone que las otras interacciones es mucho más intensas, y se trata el acoplamiento espín-órbita como una perturbación menor. En este sentido, son habituales diferentes aproximaciones, según los casos, como se detalla más abajo. Hay que tener en cuenta que a campos magnéticos altos, estos dos momentos se desacoplan, dando lugar a un patrón diferente de niveles de energía descrito por el efecto Zeeman, y disminuye la importancia relativa del término de acoplamiento espín-órbita.

Cuestionario:

1.- ¿Qué es para ti la física cuántica?

2.- ¿Qué es el efecto Zeeman

3.- ¿Qué es el efecto Stark

4.- ¿Que es un interferómetro Fabry-Perot?

5.- Describir el El efecto Paschen-Back

6.- Describir el acoplamiento espín-órbita

Debate 42. Configuración electrónica. Tabla Periódica

Revisar este link:

- Origen de los elementos https://www.youtube.com/watch?v=FTJckJPCHWA

Tabla periódica de los elementos

La tabla periódica de los elementos es una disposición de los elementos químicos en forma de tabla, ordenados por su número atómico (número de protones), por su configuración de electrones y sus propiedades químicas. Este ordenamiento muestra tendencias periódicas como elementos con comportamiento similar en la misma columna. En palabras de Theodor Benfey, la tabla y la ley periódica «son el corazón de la química —comparables a la teoría de la evolución en biología, y a las leyes de la termodinámica en la física clásica—».

Las filas de la tabla se denominan períodos y las columnas grupos. Algunos grupos tienen nombres, así por ejemplo el grupo 17 es el de los halógenos y el grupo 18 el de los gases nobles. La tabla también se divide en cuatro bloques con algunas propiedades químicas similares. Debido a que las posiciones están ordenadas, se puede utilizar la tabla para obtener relaciones entre las propiedades de los elementos, o pronosticar propiedades de elementos nuevos todavía no descubiertos o sintetizados. La tabla periódica proporciona un marco útil para analizar el comportamiento químico y es ampliamente utilizada en química y otras ciencias.

Dmitri Mendeléyev publicó en 1869 la primera versión de tabla periódica que fue ampliamente reconocida, la desarrolló para ilustrar tendencias periódicas en las propiedades de los elementos entonces conocidos, al ordenar los elementos basándose en sus propiedades químicas, si bien Julius Lothar Meyer, trabajando por separado, llevó a cabo un ordenamiento a partir de las propiedades físicas de los átomos. Mendeléyev también pronosticó algunas propiedades de elementos entonces desconocidos que anticipó que ocuparían los lugares vacíos en su tabla. Posteriormente se demostró que la mayoría de sus predicciones eran correctas cuando se descubrieron los elementos en cuestión.

La tabla periódica de Mendeléyev ha sido desde entonces ampliada y mejorada con el descubrimiento o síntesis de elementos nuevos y el desarrollo de modelos teóricos nuevos para explicar el comportamiento químico. La estructura actual fue diseñada por Alfred Werner a partir de la versión de Mendeléyev. Existen además otros arreglos periódicos de acuerdo a diferentes propiedades y según el uso que se le quiera dar (en didáctica, geología, etc). Para celebrar el 150 aniversario de su creación, la UNESCO declaró 2019 como el Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos.

Se han descubierto o sintetizado todos los elementos de número atómico del 1 (hidrógeno) al 118 (oganesón); la IUPAC confirmó los elementos 113, 115, 117 y 118 el 30 de diciembre de 2015, y sus nombres y símbolos oficiales se hicieron públicos el 28 de noviembre de 2016. Los primeros 94 existen naturalmente, aunque algunos solo se han encontrado en cantidades pequeñas y fueron sintetizados en

laboratorio antes de ser encontrados en la naturaleza. Los elementos con números atómicos del 95 al 118 solo han sido sintetizados en laboratorios. Allí también se produjeron numerosos radioisótopos sintéticos de elementos presentes en la naturaleza. Los elementos del 95 a 100 existieron en la naturaleza en tiempos pasados, pero actualmente La investigación para encontrar por síntesis nuevos elementos de números atómicos más altos continúa.

Mecánica cuántica y expansión progresiva de la tabla

La tabla periódica de Mendeléyev presentaba ciertas irregularidades y problemas. En las décadas posteriores tuvo que integrar los descubrimientos de los gases nobles, las «tierras raras» y los elementos radioactivos. Otro problema adicional eran las irregularidades que existían para compaginar el criterio de ordenación por peso atómico creciente y la agrupación por familias con propiedades químicas comunes. Ejemplos de esta dificultad se encuentran en las parejas telurio-yodo, argón-potasio y cobalto-níquel, en las que se hace necesario alterar el criterio de pesos atómicos crecientes en favor de la agrupación en familias con propiedades químicas semejantes.

Durante algún tiempo, esta cuestión no pudo resolverse satisfactoriamente hasta que Henry Moseley (1867-1919) realizó un estudio sobre los espectros de rayos X en 1913. Moseley comprobó que al representar la raíz cuadrada de la frecuencia de la radiación en función del número de orden en el sistema periódico se obtenía una recta, lo cual permitía pensar que este orden no era casual sino reflejo de alguna propiedad de la estructura atómica. Hoy sabemos que esa propiedad es el número atómico (Z) o número de cargas positivas del núcleo.

La explicación que se acepta actualmente de la ley periódica surgió tras los desarrollos teóricos producidos en el primer tercio del siglo XX, cuando se construyó la teoría de la mecánica cuántica. Gracias a estas investigaciones y a desarrollos posteriores, se acepta que la ordenación de los elementos en el sistema periódico está relacionada con la estructura electrónica de los átomos de los diversos elementos, a partir de la cual se pueden predecir sus diferentes propiedades químicas.

En 1945 Glenn Seaborg, un científico estadounidense, sugirió que los actínidos, como los lantánidos, estaban llenando un subnivel f en vez de una cuarta fila en el bloque d, como se pensaba hasta el momento. Los colegas de Seaborg le aconsejaron no publicar una teoría tan radical, ya que lo más probable era arruinar su carrera. Como consideraba que entonces no tenía una carrera que pudiera caer en descrédito, la publicó de todos modos. Posteriormente se encontró que estaba en lo cierto y en 1951 ganó el Premio Nobel de Química por su trabajo en la síntesis de los actínidos. En 1952, el científico costarricense Gil Chaverri presentó una nueva versión basada en la estructura electrónica de los elementos, la cual permite

ubicar las series de lantánidos y actínidos en una secuencia lógica de acuerdo con su número atómico. Aunque se producen de forma natural pequeñas cantidades de algunos elementos transuránicos,11 todos ellos fueron descubiertos por primera vez en laboratorios, el primero de los cuales fue el neptunio, sintetizado en 1939. La producción de estos elementos ha expandido significativamente la tabla periódica. Debido a que muchos son altamente inestables y decaen rápidamente, son difíciles de detectar y caracterizar cuando se producen. Han existido controversias relativas a la aceptación de las pretensiones y derechos de descubrimiento de algunos elementos, lo que requiere una revisión independiente para determinar cuál de las partes tiene prioridad, y por lo tanto los derechos del nombre. Flerovio (elemento 114) y livermorio (elemento 116) fueron nombrados el 31 de mayo de 2012. En 2010, una colaboración conjunta entre Rusia y Estados Unidos en Dubná, región de Moscú, Rusia, afirmó haber sintetizado seis átomos de teneso (elemento 117).

El 30 de diciembre de 2015 la IUPAC reconoció oficialmente los elementos 113, 115, 117, y 118, completando la séptima fila de la tabla periódica. El 28 de noviembre de 2016 se anunciaron los nombres oficiales y los símbolos de los últimos cuatro nuevos elementos aprobados hasta la fecha por la IUPAC (Nh, nihonio; Mc, moscovio; Ts, teneso; y Og, oganesón), que sustituyen a las designaciones temporales.

Estructura y organización de la tabla periódica

La tabla periódica actual es un sistema donde se clasifican los elementos conocidos hasta la fecha. Se colocan de izquierda a derecha y de arriba a abajo en orden creciente de sus números atómicos. Los elementos están ordenados en siete hileras horizontales llamadas periodos, y en 18 columnas verticales llamadas grupos o familias.

Hacia abajo y a la izquierda aumenta el radio atómico y el radio iónico.
Hacia arriba y a la derecha aumenta la energía de ionización, la afinidad electrónica y la electronegatividad.

Grupos

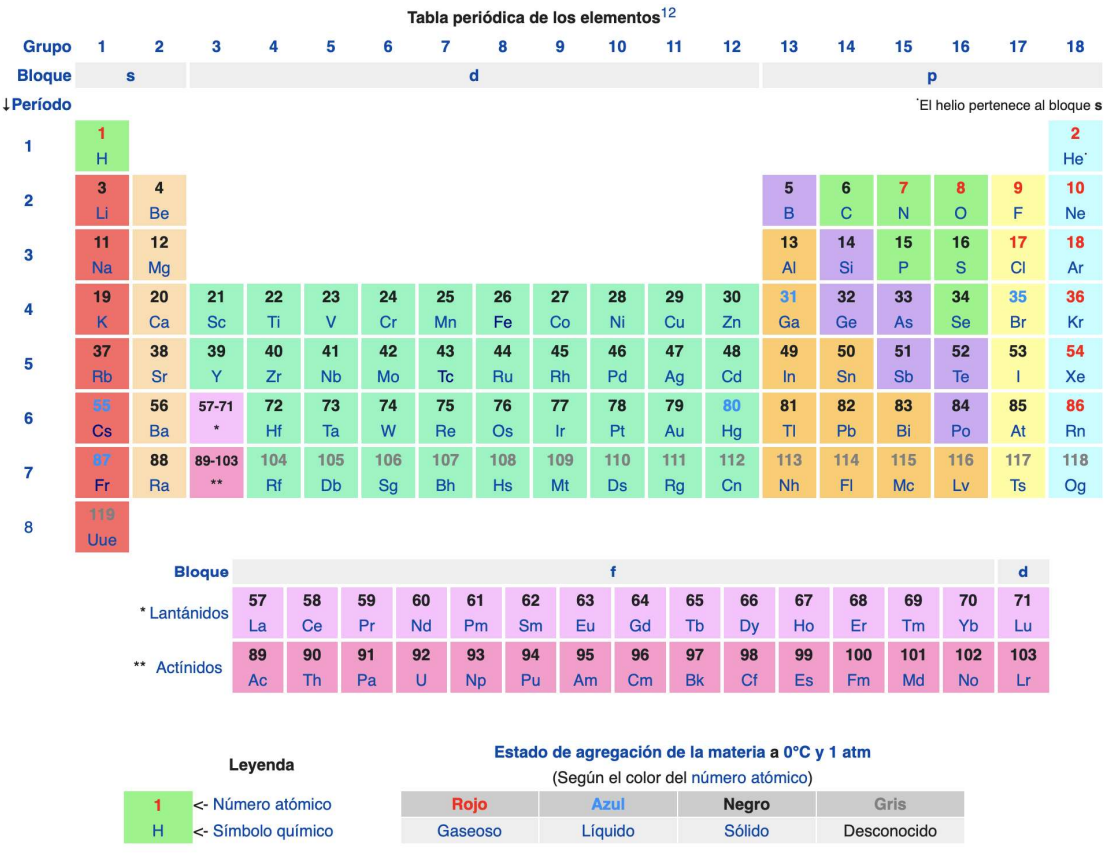
A las columnas verticales de la tabla se las conoce como grupos o familias. Hay 18 grupos en la tabla periódica estándar. En virtud de un convenio internacional de denominación, los grupos están numerados de 1 a 18 desde la columna más a la izquierda —los metales alcalinos— hasta la columna más a la derecha —los gases nobles—.

Anteriormente se utilizaban números romanos según la última cifra del convenio de denominación de hoy en día —por ejemplo, los elementos del grupo 4 estaban en el IVB y los del grupo 14 en el IVA—. En Estados Unidos, los números romanos fueron

seguidos por una letra «A» si el grupo estaba en el bloque s o p, o una «B» si pertenecía al d. En Europa, se utilizaban letras en forma similar, excepto que «A» se usaba si era un grupo precedente al 10, y «B» para el 10 o posteriores. Además, solía tratarse a los grupos 8, 9 y 10 como un único grupo triple, conocido colectivamente en ambas notaciones como grupo VIII. En 1988 se puso en uso el nuevo sistema de nomenclatura IUPAC y se desecharon los nombres de grupo previos.

Algunos de estos grupos tienen nombres triviales —no sistemáticos—, como se ve en la tabla de abajo, aunque no siempre se utilizan. Los grupos del 3 al 10 no tienen nombres comunes y se denominan simplemente mediante sus números de grupo o por el nombre de su primer miembro —por ejemplo, «el grupo de escandio» para el 3—, ya que presentan un menor número de similitudes y/o tendencias verticales.

La explicación moderna del ordenamiento en la tabla periódica es que los elementos de un grupo poseen configuraciones electrónicas similares y la misma valencia, entendida como el número de electrones en la última capa. Dado que las propiedades químicas dependen profundamente de las interacciones de los electrones que están ubicados en los niveles más externos, los elementos de un mismo grupo tienen propiedades químicas similares y muestran una tendencia clara en sus propiedades al aumentar el número atómico.



Cuestionario:

1.- ¿Cuántos elementos tiene y cómo se ordenan?

2.- Explicar por qué los elementos de una misma columna tienen el mismo tipo de distribución de electrones en la capa más externa

3.- ¿Qué son los pesos atómicos

4.- Describir la Ley de las octavas de Newlands

5.- ¿Qué describen exactamente los Bloques en la tabla periódica?

Debate 43. Láseres

- Cómo funciona un láser
  https://www.youtube.com/watch?v=8UbnJ3b8YzY 5:08

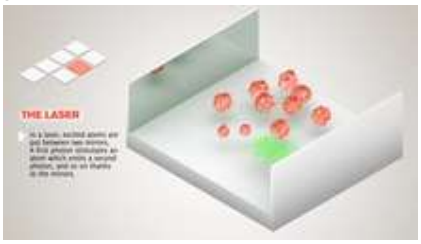
- Microscopía Láser
  https://www.youtube.com/watch?v=sOXUfTg1Lo0 30:54

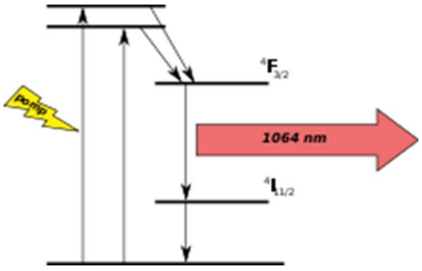
Láseres:

Un láser (del acrónimo inglés LASER, light amplification by stimulated emission of radiation; Luz amplificada por emisión de radiación estimulada) es un dispositivo que utiliza un efecto de la mecánica cuántica, la emisión inducida o estimulada, para generar un haz de luz coherente tanto espacial como temporalmente. La coherencia espacial se corresponde con la capacidad de un haz para permanecer con un pequeño tamaño al transmitirse por el vacío en largas distancias y la coherencia temporal se relaciona con la capacidad para concentrar la emisión en un rango espectral muy estrecho.

Mecanismos de la acción láser

Si bien existen varios mecanismos que producen emisión láser, se describe el ejemplo sencillo de un láser de cuatro niveles con bombeo óptico continuo, como puede ser el láser de neodimio.





Niveles electrónicos involucrados en la emisión láser de iones de neodimio trivalentes.

Absorción del bombeo y transiciones no radiativas

En el estado inicial, la mayoría de los electrones se encuentran en el estado fundamental y son excitados mediante un haz de luz de bombeo que contiene energía en las bandas de absorción del neodimio. Los electrones excitados en varios niveles se desexcitan rápidamente de forma no radiativa hacia un nivel metaestable, que en el caso del neodimio es el 4F3/2 donde permanece un tiempo relativamente largo, decayendo lentamente al nivel fundamental y al nivel 4I11/2. Si se cumplen ciertas condiciones en el material y la potencia de bombeo, es posible que se produzca la inversión de población, esto es, que existan más átomos excitados en el nivel 4F3/2 que los que están en el nivel inferior 4I11/2.

Emisión estimulada

Desde el nivel metaestable 4F3/2 pueden desexcitarse espontáneamente algunos electrones que producen una emisión de luz a 1 064 nm. Algunos de estos se emiten en el ángulo correcto para reflejarse por los espejos de la cavidad un número elevado de veces. Estos fotones que se reflejan con el ángulo correcto pasan varias veces cerca de átomos excitados de neodimio y producen la emisión estimulada de radiación.

Si el medio activo se encuentra en la condición de inversión de población y las pérdidas de la cavidad son inferiores a la ganancia del medio activo, ocurre que al

reflejarse en las paredes de la cavidad se produce una amplificación del primer fotón que se emitió espontáneamente. Tras un número determinado de reflexiones, la intensidad dentro de la cavidad es muy elevada, y las pequeñas perdidas del espejo acoplador son la radiación láser que emite el dispositivo.

Diodo láser: Un diodo láser (DL) es un dispositivo semiconductor similar a un led pero que bajo las condiciones adecuadas emite luz láser.

Visión general

Cuando un diodo convencional o led se polariza en directa, los huecos de la zona p se mueven hacia la zona n y los electrones de la zona n hacia la zona p; ambos desplazamientos de cargas constituyen la corriente que circula por el diodo. Si los electrones y huecos están en la misma región, pueden recombinarse cayendo el electrón al hueco y emitiendo un fotón con la energía correspondiente a la banda prohibida (semiconductor).

Esta emisión espontánea se produce normalmente en los diodos semiconductores, pero solo es visible en algunos de ellos (como los ledes), que tienen una disposición constructiva especial con el propósito de evitar que la radiación sea reabsorbida por el material circundante, y habitualmente una energía de la banda prohibida coincidente con la correspondiente al espectro visible; en otros diodos, la energía se libera principalmente en forma de calor, radiación infrarroja o radiación ultravioleta. En condiciones apropiadas, el electrón y el hueco pueden coexistir un breve tiempo, del orden de nanosegundos, antes de recombinarse, de forma que si un fotón con la energía apropiada pasa por casualidad por allí durante ese periodo, se producirá la emisión estimulada (véase láser), es decir, al producirse la recombinación el fotón emitido tendrá igual frecuencia, polarización y fase que el primer fotón.

En los diodos láser, para favorecer la emisión estimulada y generación de luz láser, el cristal semiconductor del diodo puede tener la forma de una lámina delgada con un lado totalmente reflectante y otro solo reflectante de forma parcial (aunque muy reflectante también), lográndose así una unión PN de grandes dimensiones con las caras exteriores perfectamente paralelas y reflectantes. Es importante aclarar que las dimensiones de la unión PN guardan una estrecha relación con la longitud de onda a emitir.

Este conjunto forma una guía de onda similar a un resonador de tipo Fabry-Perot. En ella, los fotones emitidos en la dirección adecuada se reflejarán repetidamente en dichas caras reflectantes (en una totalmente y en la otra solo parcialmente), lo que ayuda a su vez a la emisión de más fotones estimulados dentro del material semiconductor y consiguientemente a que se amplifique la luz (mientras dure el bombeo derivado de la circulación de corriente por el diodo). Parte de estos fotones saldrán del diodo láser a través de la cara parcialmente transparente (la que es solo

reflectante de forma parcial). Este proceso da lugar a que el diodo emita luz, que al ser coherente en su mayor parte (debido a la emisión estimulada), posee una gran pureza espectral. Por tanto, como la luz emitida por este tipo de diodos es de tipo láser, a estos diodos se los conoce por el mismo nombre.

Características

- Luz sincronizada.
- Luz con misma frecuencia y fase.

Aplicaciones

- Comunicaciones de datos por fibra óptica.
- Lectores de CD, DVD, Blu-rays, HD DVD, entre otros.
- Interconexiones ópticas entre circuitos integrados.
- Impresoras láser.
- Escáneres o digitalizadores.
- Sensores.
- Tratamiento con láser odontológico.
- Depilación corporal.
- Pantalla láser
- Odontología
- Oftalmología

Ventajas y desventajas

- Ventajas
    - Son muy eficientes.
    - Son muy fiables.
    - Tienen tiempos medios de vida muy largos.
    - Son económicos.
    - Permiten la modulación directa de la radiación emitida, pudiéndose modular a décimas de Gigahercio.
    - Su volumen y peso son pequeños.
    - El umbral de corriente que necesitan para funcionar es relativamente bajo.
    - Su consumo de energía es reducido (comparado con otras fuentes de luz)
    - El ancho de banda de su espectro de emisión es angosto (puede llegar a ser de solo algunos kHz)
- Desventajas
    - Una baja potencia a consecuencia de las bandas de energía ocupadas por los electrones.
    - Una alta sensibilidad a los cambios de temperatura.
    - Alto calentamiento al pasar corriente sobre el material diodo.
    - Poca colimación en el haz obtenido.

- A pesar de las desventajas, el láser de semiconductores es el segundo más vendido después del láser He-Ne por sus usos en computadoras, impresoras, medios de comunicación, tratamientos médicos, etc.

Una clase especial: VCSEL (Vertical cavity surface emitting laser)

Los VCSEL (vertical-cavity surface-emitting lasers) son láseres de semiconductor en los que la luz se propaga perpendicularmente al plano de la región activa. Algunas de sus características más interesantes son: consumir poca potencia, poder operar en un solo modo longitudinal, emitir un haz circular que hace más fácil su acoplamiento a fibra, baja corriente umbral y fabricación barata. Por otra parte, debido a su pequeño tamaño y a su estructura vertical pueden realizarse agrupaciones bidimensionales de láseres. Se ha conseguido incluso producir en masa VCSELs de tamaño reducido, lo que los ha convertido en la fuente de luz más adecuada para los sistemas de comunicaciones a corta distancia a través de fibra óptica. Por otra parte, el reducido tamaño de estos láseres hace necesaria la existencia de espejos de alta reflectividad para poder generar la emisión láser. Por todas estas razones, los VCSELs son una opción atractiva en el mercado de las comunicaciones ópticas, pudiendo también ser empleados en lectores de códigos de barras, impresoras, ratones, etc. Los VCSELs también son dispositivos interesantes en el campo del procesamiento todo–óptico de señales para su uso como regeneradores e inversores todo–ópticos, dispositivos biestables (“flip–flop”) todo–ópticos y memorias ópticas. Este tipo de dispositivos se basan en el comportamiento óptico biestable, que puede conseguirse mediante la inyección óptica en láseres de semiconductor.

Láser azul: Un láser azul es un láser que emite radiación electromagnética con una longitud de onda entre 360 y 480 nanómetros (nm), la cual el ojo del ser humano percibe como azul o violeta. Los haces azules son producidos por láseres de gas de helio-cadmio de 441.6 nm, y láseres de iones de argón de 458 a 488 nm. Los láseres diodo con haces azules por lo general se basan en nitruro de galio (GaN; color violeta) o nitruro de galio-indio (a menudo de un verdadero color azul, pero que también puede producir otros colores). Los láseres azul y violeta también pueden ser fabricados utilizando duplicación de frecuencia de longitudes de onda láser infrarrojas emitidas por láseres de diodos o láseres de estado sólido estimulados por diodos. Los láseres a base de diodos que emiten luz de 445 nm han alcanzado popularidad como láseres portátiles. Los láseres que emiten longitudes de onda de menos de 445 nm se perciben de color violeta (aunque a veces se los denomine láseres azules). Algunos de los láseres azules más comunes comercialmente son láseres de diodos utilizados por dispositivos tipo Blu-ray que emiten luz "violeta" de 405 nm, la cual es una longitud de onda lo suficientemente corta como para producir fluorescencia en algunos elementos químicos, en forma similar a la fluorescencia que produce la radiación ultravioleta ("efecto luz negra"). La luz con longitud de onda menor que 400 nm es clasificada como ultravioleta.

Los dispositivos que utilizan luz láser azul son utilizados en diversas áreas que van desde almacenamiento de alta densidad de información mediante optoelectrónica a usos en la medicina.

Láseres a base de semiconductores

Los láseres rojos se pueden fabricar sobre semiconductores de arseniuro de galio (GaAs), sobre los que se depositan una docena de capas de átomos para conformar la porción del láser que genera luz a partir de los pozos cuánticos. Utilizando métodos similares a los que se usan para el silicio, es posible fabricar un substrato libre de los defectos denominados dislocaciones, y ordenar los átomos de forma tal que las distancias entre los que hacen tierra y los que conforman los pozos cuánticos sea la misma.

Sin embargo, el mejor material semiconductor para los láseres azules son los cristales de nitruro de galio (GaN), los cuales son más difíciles de fabricar, siendo necesario utilizar presiones y temperaturas muy elevadas, similares a las que se utilizan para producir diamantes sintéticos, además de gas nitrógeno a alta presión. Las dificultades técnicas parecían imposibles de resolver, por lo cual los investigadores desde la década de 1960 han intentado depositar GaN sobre una base de zafiro el cual es un material fácilmente conseguible. Sin embargo una falta de alineamiento entre las estructuras del zafiro y el nitruro de galio hace que se produzcan una cantidad elevada de defectos. En 1992 el inventor japonés Shuji Nakamura inventó el primer LED azul eficiente, y cuatro años después el primer láser azul. Nakamura utilizó el material depositado sobre un substrato de zafiro, aunque la cantidad de defectos remanentes era aun muy elevada (106–1010/cm²) dificultando en gran medida la construcción de un láser de alta potencia. A comienzos de la década de 1990 el Instituto de Física de Altas Presiones de la Academia Polaca de Ciencias en Varsovia (Polonia), bajo el liderazgo del Dr. Sylwester Porowski desarrolló la tecnología para fabricar cristales de nitruro de galio con una elevada calidad estructural y menos de 100 defectos por centímetro cuadrado — por lo menos 10,000 veces mejor que el mejor cristal fabricado sobre zafiro. En 1999, Nakamura probó cristales polacos, y pudo fabricar láseres con el doble de potencia y una duración 10 veces mayor — 3,000 horas a una potencia de 30 mW. Un desarrollo adicional de la tecnología permitió la producción en masa del dispositivo. En la actualidad, los láseres azules utilizan una superficie de zafiro recubierta de una capa de nitruro de galio (esta tecnología es la que utiliza la empresa japonesa Nichia, la cual posee un acuerdo con Sony), y láseres azules a base de semiconductores que utilizan una superficie monocristal de nitruro de galio (compañía polaca TopGaN).

Tras 10 años, los fabricantes japoneses consiguieron producir un láser azul de 60 mW de potencia, lo que permitió utilizarlo para leer con velocidad un gran flujo de

datos del Blu-ray, BD-R, y BD-RE. Si bien la tecnología polaca es más económica que la japonesa su porción del mercado es menor. Existe otra empresa polaca de alta tecnología que fabrica cristales de nitruro de galio – Ammono, pero esta empresa no produce láseres azules.

Por su trabajo, Nakamura fue distinguido en el 2006 con el Millennium Technology Prize, y en el 2014 se le otorgó el Premio Nobel de Física.

Hasta fines de la década de 1990, cuando se desarrollaron los láseres azules de semiconductores, los láseres azules eran láseres de gas, instrumentos voluminosos y costosos que operaban a base de inversión de población en mezclas de gases raros y requerían de corrientes elevadas y un importante sistema de remoción de calor.

Gracias al desarrollo realizado por numerosos grupos, incluidos especialmente, el grupo del profesor Isamu Akasaki, Shuji Nakamura en la Nichia Corporation y Sony Corporation en Anan (Tokushima-ken, Japón) varios inventos posibilitaron el desarrollo de láseres semiconductores azul y violeta comercialmente viables. La capa activa de los dispositivos Nichia era formada mediante pozos cuánticos de InGaN o puntos cuánticos formados de manera espontánea mediante autoensamblaje. El nuevo invento permitió el desarrollo de láseres azules pequeños, convenientes y a bajo precio, violeta y ultravioleta (UV), que no estaban disponibles con anterioridad, y fue el disparador del desarrollo de usos tales como los sistemas de almacenamiento de datos de alta densidad HD DVD y discos Blu-ray. Las longitudes de onda menores permitieron que el láser pudiera ser utilizado para leer discos conteniendo mucha más información

Isamu Akasaki, Hiroshi Amano y Shuji Nakamura ganaron en el 2014 el Premio Nobel de Física "por inventar diodos de emisión de luz azul eficientes que han permitido disponer de fuentes de luz brillantes y que ahorran energía".

Láseres de estado sólido estimulados por diodos

Los punteros láser azul, que salieron al mercado en el 2006, tenían la misma constitución básica que los láseres verdes DPSS. La mayoría emite luz de 473 nm, la cual se produce duplicando la frecuencia de radiación láser de 946 nm proveniente de un cristal de Nd:YAG o Nd:YVO4 estimulado por diodos. Los cristales dopados con Neodimio por lo general producen una longitud de onda principal de 1064 nm, pero si se los provee de las superficies reflectantes adecuadas se los puede hacer funcionar a longitudes de onda distintas de las longitudes de onda principales del Neodimio, tal como la transición de 946 nm que se utiliza en las aplicaciones del láser azul. Para potencias elevadas se utilizan cristales de BBO como duplicadores de frecuencia; mientras que para potencias bajas se utiliza KTP. Las potencias de salida conseguibles alcanzan los 5000 mW.

La eficiencia de conversión para producir radiación láser de 473 nm es ineficiente y los mejores laboratorios apenas logran eficiencias de 10-15% en la conversión de radiación láser de 946 nm a radiación láser de 473 nm. En aplicaciones prácticas, la eficiencia es aun menor. A causa de esta baja eficiencia de conversión, el uso de un diodo IR de 1000 mW IR a lo sumo produce 150 mW de luz azul visible.

Los láseres azules se fabrican directamente con semiconductores de InGaN, los cuales producen luz azul sin necesidad de duplicar la frecuencia. En la actualidad en el mercado se encuentran disponibles láseres diodos azules de 445 nm a 465 nm. Los dispositivos proveen luz significativamente más brillante que los diodos láser de 405 nm, dado que la longitud de onda mayor es muy próxima al punto de máxima sensibilidad del ojo humano. Los dispositivos comerciales tales como los proyectores láser han permitido reducir los precios de este tipo de diodos.

Punto cuántico

Un punto cuántico (en inglés, quantum dot o QD) generalmente es una nanoestructura semiconductora que confina el movimiento en las tres direcciones espaciales de los electrones de la banda de conducción y los huecos de la banda de valencia o excitones (pares de enlaces de electrones de la banda de conducción y huecos de la banda de valencia). Fue descubierto por primera vez en una matriz de vidrio y en soluciones coloidales a partir de 1981 por los científicos rusos Aleksey Ekimov y Alexander Efros y luego complementado por Louis E. Brus. El término «pozo cuántico» fue acuñado en 1988.

En el mundo macroscópico, los puntos cuánticos pueden tener el aspecto de una simple pastilla plana, o estar disueltos en un líquido. Nadie sospecharía que esa sustancia ha sido elaborada en el laboratorio partiendo de unos pocos átomos, con técnicas que manipulan la materia a escalas de nanómetros. A esas dimensiones el material se convierte en una matriz sobre la que han crecido estructuras, como pirámides o montañas, formadas por unos pocos cientos o miles de átomos. Esas estructuras son los puntos cuánticos. El confinamiento se puede deber a los potenciales electrostáticos (generados por electrodos externos, dopaje, tensión, impurezas, etc.), a la presencia de una interfaz entre diferentes materiales semiconductores (ej. en sistemas de nanocristales de núcleo-coraza), a la presencia de la superficie del semiconductor (ej. nanocristal semiconductor), o a una combinación de estos.

Un punto cuántico tiene un espectro discreto de energía cuantizada. Las funciones de onda correspondientes están espacialmente localizadas dentro del punto cuántico, pero se extienden sobre muchos períodos de la red cristalina. Un punto cuántico contiene un número reducido, y finito, de electrones de la banda de conducción (del orden de 1 a 100), huecos en la banda de valencia, o de excitones, es decir, un número finito de cargas eléctricas elementales. Una de las propiedades

más interesantes de los puntos cuánticos es que, al ser iluminados, re-emiten luz en una longitud de onda muy específica y que depende del tamaño de este. Este fenómeno se conoce como luminiscencia. Cuanto más pequeños sean los puntos, menor es la longitud de onda y más acusadas las propiedades cuánticas de la luz que emiten. Estas propiedades de emisión son emergente de un proceso físico denominado confinamiento cuántico. Cuando los electrones son confinados a volúmenes muy pequeños, comparables con su longitud de onda de De Broglie, se comportan como una partícula cuántica en un pozo de potencial. La partícula entonces solo puede estar en determinados estados electrones de energía característica. Cuando los electrones absorben energía puede transitar a niveles electrónicos de mayor energía. Al des-excitarse a su nivel electrónico inicial, el exceso de energía es emitido en forma de fotones. Existen también puntos cuánticos metálicos, los cuales son estructuras metálicas muy pequeñas del orden de 10 a 300 átomos y en los cuales las propiedades de confinamiento cuántico dan lugar a fenómenos de excitación y emisión similar a los observados en puntos cuánticos semiconductores. Hay una gran variedad de implementaciones de puntos cuánticos, partiendo de compuestos químicos y técnicas físicas muy diferentes

Cuestionario:

1.- ¿Qué es y cómo funciona un Láser?

2.- ¿Qué es un láser VCSEL?

3.- ¿Qué es un punto cuántico?

4.- ¿Cómo funciona un láser azul?

5.- ¿Que es un resonador de tipo Fabry-Perot?

Debate 44. ¿Qué es realmente el espín del electrón?

- ¿Qué es REALMENTE el spin del electrón? https://www.youtube.com/watch?v=JaZwliv9isQ 1:20;41
- ESPINTRÓNICA https://www.youtube.com/watch?v=_No4qr7uOg8 6:39

El espín (del inglés spin 'giro, girar') es una propiedad física de las partículas elementales por el cual tienen un momento angular intrínseco de valor fijo. El espín fue introducido en 1925 por Ralph Kronig e, independientemente, por George Uhlenbeck y Samuel Goudsmit. La otra propiedad intrínseca de las partículas elementales es la carga eléctrica.

Si bien la teoría cuántica de la época no podía explicar algunas propiedades de los espectros atómicos, los físicos Goudsmit y Uhlenbeck descubrieron que, añadiendo un número cuántico adicional —el «número cuántico de espín»— se lograba dar una explicación más completa de los espectros atómicos. La primera evidencia experimental de la existencia del espín se produjo con el experimento realizado en 1922 por Otto Stern y Walther Gerlach, aunque su interpretación no llegara sino hasta 1927. Pronto, el concepto de espín se amplió a todas las partículas subatómicas, incluidos los protones, los neutrones y las antipartículas.

El espín proporciona una medida del momento angular intrínseco de toda partícula. En contraste con la mecánica clásica, donde el momento angular se asocia a la rotación de un objeto extenso, el espín es un fenómeno exclusivamente cuántico, que no se puede relacionar de forma directa con una rotación en el espacio. La intuición de que el espín corresponde al momento angular debido a la rotación de la partícula en torno a su propio eje solo debe tenerse como una imagen mental útil, puesto que, tal como se deduce de la teoría cuántica relativista, el espín no tiene una representación en términos de coordenadas espaciales, de modo que no se puede referir ningún tipo de movimiento. Eso implica que cualquier observador al hacer una medida del momento angular detectará inevitablemente que la partícula posee un momento angular intrínseco total, difiriendo observadores diferentes solo sobre la dirección de dicho momento, y no sobre su valor (este último hecho no tiene análogo en mecánica clásica).

Existe una relación directa entre el espín de una partícula y la estadística que obedece en un sistema colectivo de muchas de ellas. Esta relación, conocida empíricamente, es demostrable en teoría cuántica de campos relativistas.

Propiedades del espín

Como propiedad mecanocuántica, el espín presenta una serie de cualidades que lo distinguen del momento angular clásico:

- El valor de espín está cuantizado, por tanto no se pueden encontrar partículas con espín de cualquier valor.
- El espín de una partícula siempre es un múltiplo entero de $\hbar/2$ (donde $\hbar$ es igual a h la constante de Planck dividida entre , también llamada constante

reducida de Planck). Esto está relacionado con las diferentes representaciones irreducibles del grupo de rotaciones SO(3), cada una de ellas caracterizada por un número entero m.

- Cuando se mide el espín en diferentes direcciones, sólo se obtienen una seriede valores posibles, que son sus posibles proyecciones sobre esa dirección. Por ejemplo, la proyección del momento angular del espín de un electrón, si se mide en una dirección particular dada por un campo magnético externo, puede resultar únicamente en los valores $\hbar/2$ o bien -$\hbar/2$.
- Además, la magnitud total del espín es única para cada tipo de partícula elemental. Para los electrones, los protones y los neutrones, esta magnitud es, en unidades de $\hbar \cdot \sqrt{s(s+1)}$, siendo $s = 1/2$
  Esto contrasta con el caso clásico donde el momento angular de un cuerpo alrededor de su eje puede asumir diferentes valores según la rotación sea más o menos rápida.

Espintrónica

Espintrónica (neologismo a partir de "espín" y "electrónica" y conocido también como magneto electrónica) es una tecnología emergente que explota tanto la carga del electrón como su espín, que se manifiesta como un estado de energía magnética débil que puede tomar solo dos valores, $+\hbar/2$ o $-\hbar/2$(donde $\hbar$ es la constante de Planck dividida por 2π o constante reducida de Planck).

El primer requisito para construir un dispositivo espintrónico es disponer de un sistema que pueda generar una corriente de electrones "espín polarizados" (es decir, que tengan el mismo valor para su espín) y de otro sistema que sea sensible a esa polarización. Un paso más radical sería tener una unidad intermedia que realice algún tipo de procesamiento en la corriente, de acuerdo con los estados de los espines.

Un dispositivo espintrónico simple debería permitir la transmisión de un par de señales por un único canal usando electrones "espín polarizados" y produciendo una señal diferente para los dos valores posibles, duplicando así el ancho de banda del cable.

El método más simple de que una corriente sea "espín polarizada" es hacerla pasar a través de un material ferromagnético, que debe ser un cristal único, de forma tal de que filtre a los electrones de manera uniforme. Si en cambio se dispone el filtro frente a un transistor, este se convertirá en un detector sensible a los espines.

Si los dos campos magnéticos están alineados, entonces la corriente podrá pasar, mientras que si se oponen aumentará la resistencia del sistema, efecto conocido como magnetorresistencia gigante.

Probablemente el dispositivo espintrónico más exitoso hasta el momento haya sido la válvula espín, un dispositivo con una estructura de capas de materiales magnéticos que muestra enorme sensibilidad a los campos magnéticos. Cuando uno de estos campos está presente, la válvula permite el paso de los electrones, pero en caso contrario sólo deja pasar a los electrones con un espín determinado. Desde 2002 ha sido común su uso como transductor en cabezas de discos duros.

La espintrónica puede tener un impacto radical en los dispositivos de almacenamiento masivo; científicos de IBM anunciaron en 2002 la compresión en un área diminuta de cantidades enormes de datos, alcanzando una densidad de aproximadamente 155.000 millones de bits por cm^2.

El uso convencional del estado de un electrón en un semiconductor es la representación binaria, pero los "bits cuánticos" de la espintrónica (qubits) explotan a los estados del espín como superposiciones de 0 y 1 que pueden representar simultáneamente cada número entre 0 y 255. Esto puede dar lugar a una nueva generación de ordenadores (computación cuántica).

Magnetorresistencia Gigante

La magnetorresistencia es una propiedad que tienen ciertos materiales de variar su resistencia eléctrica cuando son sometidas a un campo magnético. Este efecto fue descubierto por William Thomson en 1857, aunque no fue capaz de disminuir la resistencia en más de un 5 % (hoy en día se llega hasta al 600 %).

Las investigaciones recientes han permitido descubrir materiales que presentan efecto GMR (giant magneto-resistance:, ‘magneto-resistencia gigante’), efecto CMR (colossal magneto-resistance: ‘magnetorresistencia colosal’) y efecto TMR (tunnel magneto-resistance: ‘magnetorresistencia de túnel’).

Tanto la MR como la GMR se basan en el espín de los electrones y por eso forman parte de la espintrónica.

Las computadoras actuales hacen uso de esta propiedad. Los discos duros utilizan bien magnetorresistencia, bien magnetorresistencia gigante. Las cabezas lectoras de los discos duros están compuestas por un grupo de elementos tal que su resistencia eléctrica depende del campo magnético. Los “bits” en un disco duro se

guardan como un pequeño imán. La cabeza de lectura eléctrica tiene una resistencia eléctrica (MR) que varía cuando pasa por encima del “pequeño imán” que es un bit. Por tanto, cuando un bit pasa por debajo de la cabeza lectora hay una variación de la resistencia que puede detectarse fácilmente.

Magnetorresistencia gigante

La magnetorresistencia gigante o colosal (en inglés, Giant Magnetoresistance Effect o GMR) es un efecto mecánico cuántico que se observa en estructuras de película delgada compuestas de capas alternadas ferromagnéticas y no magnéticas. Se manifiesta en forma de una bajada significativa de la resistencia eléctrica observada bajo la aplicación de un campo magnético externo: cuando el campo es nulo, las dos capas ferromagnéticas adyacentes tienen una magnetización antiparalela puesto que están sometidas a un acoplamiento ferromagnético débil entre las capas. Bajo efecto de un campo magnético externo, las magnetizaciones respectivas de las dos capas se alinean y la resistencia de la multicapa cae de manera súbita. Los spines de los electrones de la sustancia no magnética se alinean en igual número de manera paralela y antiparalela al campo magnético aplicado, y por tanto sufren un cambio de difusión magnética en una menor medida respecto a las capas ferromagnéticas que se magnetizan de forma paralela.

Magnónica

La magnónica está basada en la nanoestructuración de materiales magnéticos y permite transmitir, procesar y detectar la información usando magnones (ondas de espin de electrón) de manera controlada.

Hasta el momento los experimentos en este reciente campo de investigación se han concentrado en estudiar la propagación de ondas a través del giro de momentos magnéticos locales en una película continua o en una película con rendijas situadas periódicamente. De forma distinta y novedosa, el grupo MAGNETRANS de la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) decidió usar los nanoimanes en estado de vórtice magnético para trasmitir y procesar la información.

Este tipo de soporte magnético (discos magnéticos en estado de vórtice y acoplados dinámicamente entre sí, como muestra el esquema) es esencialmente nuevo, y podría ofrecer no sólo formas inéditas de transmitir información en el rango de frecuencias de hasta decenas de gigahercios (decenas de miles de millones de veces en un segundo), sino también filtrar la información de manera precisa usando movimientos rotacionales de los vórtices y, lo que es muy importante, sin necesidad de crear campos magnéticos internos de elevada intensidad.

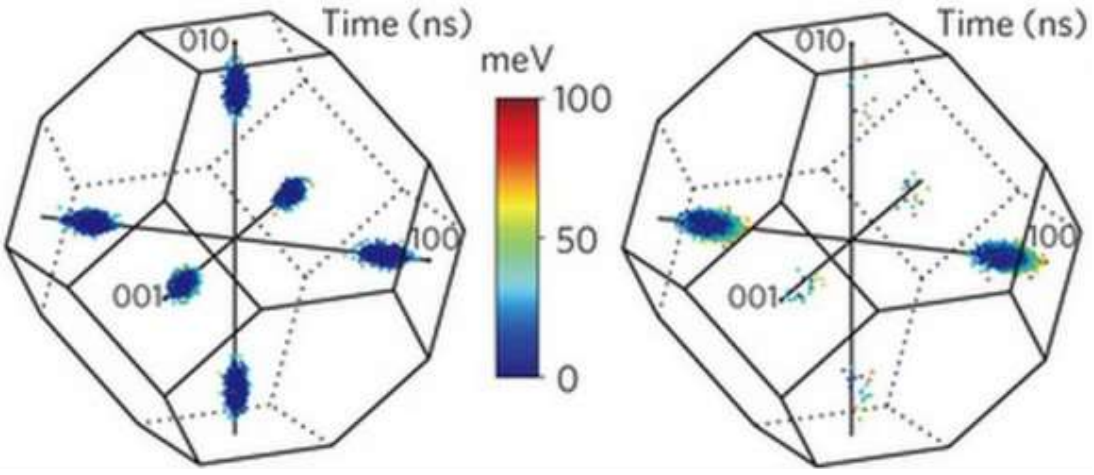
Esta investigación, que es tanto de carácter fundamental como aplicado, y que se publicó recientemente en Applied Physics Letters, fue realizada por el becario de investigación de la UAM Ahmad Awad, bajo la dirección del profesor Farkhad Aliev, en una estrecha colaboración con científicos de de la Universidad del País Vasco y la Universidad de Universidad de Oporto.

La observación de la variación de excitaciones de magnones en función de la distancia entre los nanoimanes fue llevada a cabo en un novedoso sistema experimental que permite el estudio de excitaciones dinámicas de nanoestructuras magnéticas y superconductoras en un amplísimo rango de temperaturas (desde temperatura ambiente hasta -272º), y en campos magnéticos de hasta 9 Tesla (lo que equivale a casi un millón de veces el campo magnético terrestre).

Tecnologías emergentes

Los enormes progresos que se han producido en nanofabricacion durante la última década han permitido el desarrollo de nuevos materiales y tecnologías de procesamiento y de transmisión de información relacionadas con estos materiales. Entre los diversos nuevos desarrollos se pueden mencionar la fotónica(manejo de luz en materiales ópticos nanoestructurados), la plasmónica(utilización de excitaciones electrónicas superficiales en materiales metálicos) o la espintrónica (manejo del espín además de la carga del electrón en dispositivos electrónicos).

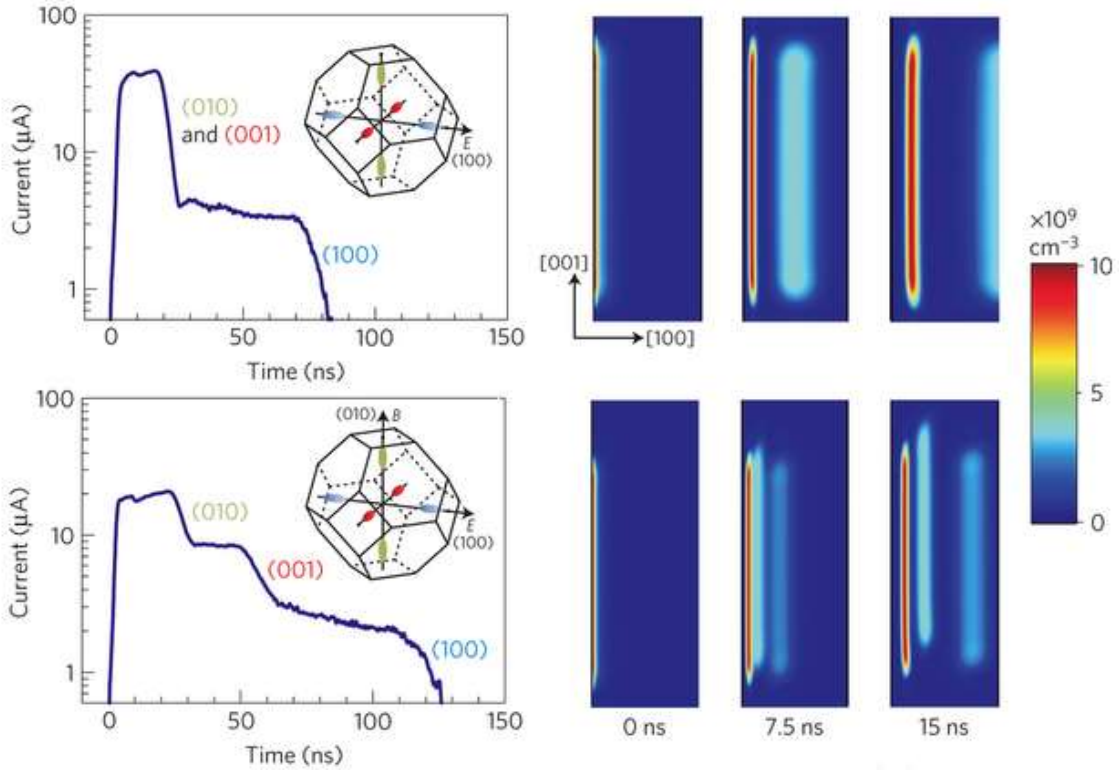
En muchos sentidos las nanoestructuras magnéticas, de las que se ocupa la magnónica, tienen una mayor versatilidad de transmisión de información en comparación con los sistemas ópticos o los metales no magnéticos, ya que la aplicación de un campo magnético o de una corriente externa permite cambiar fácilmente los parámetros del dispositivo.



Hacia un nuevo tipo de electrónica en diamante, la «valletrónica»

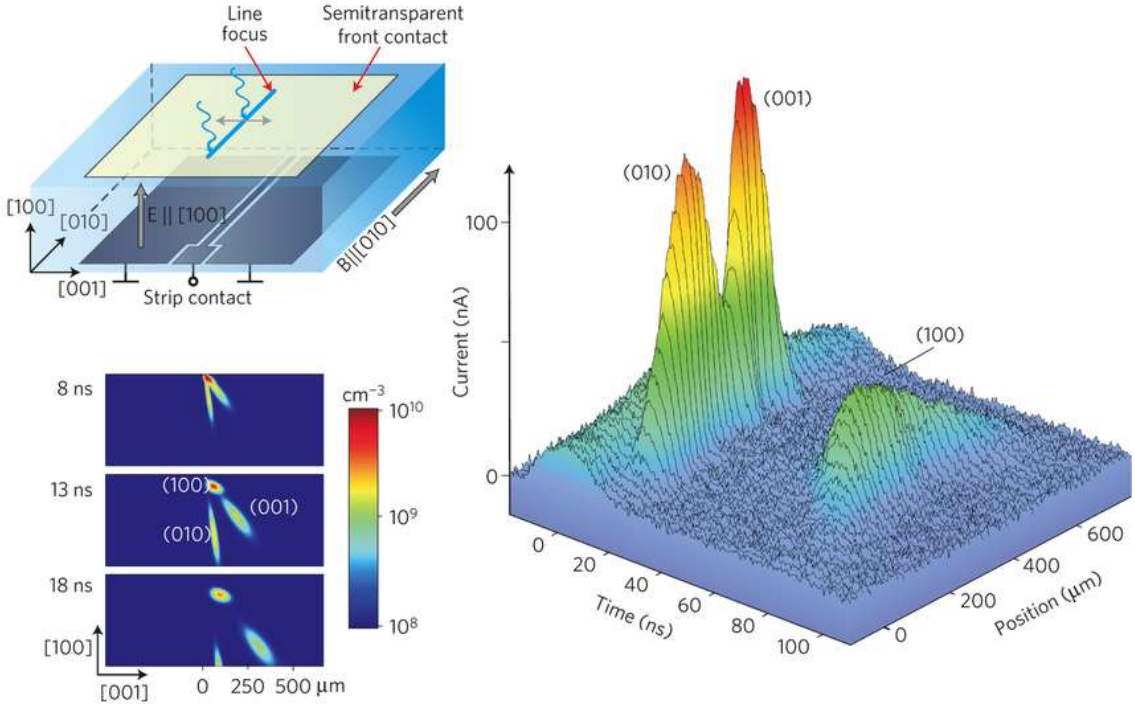
Por Francisco R. Villatoro, el 24 julio, 2013

No hay dos sin tres. La electrónica y la espintrónica tienen compañía, la «valletrónica» (valleytronics), basada en los «valles» del espectro de energía de la banda de conducción que aparecen en un cristal que posee diferentes ejes de simetría, en lugar de la carga eléctrica o el espín de los electrones. Estos «valles» pueden atrapar electrones en momento lineal (no en posición), es decir, canalizan el flujo de carga. Cuando hay dos o más «valles» en la banda de conducción se pueden realizar dispositivos que controlen el flujo de carga atrapado en ellos. Se publica en Nature Materials el primer artículo que ha logrado controlar este fenómeno (la generación, transporte en distancias macroscópicas y detección de electrones «valle» de polarización) gracias a que en diamante los tiempos de relajación son grandes, unos 300 ns a una temperatura de 77 K. La clave del hallazgo es la ultrapureza del diamante utilizado (menos de 10-13 defectos extrínsecos por cm³). Aunque la «valletrónica» acaba de nacer y no sabemos qué futuro tendrá (ni siquiera si llegará a adulta), este tipo de investigación me parece muy sugerente. Nos lo cuenta Christoph E. Nebel, «Valleytronics: Electrons dance in diamond,» Nature Materials 12: 690–691, 23 Jul 2013, que se hace eco del artículo técnico de Jan Isberg et al., «Generation, transport and detection of valley-polarized electrons in diamond,» Nature Materials 12: 760–764, 14 Jul 2013.

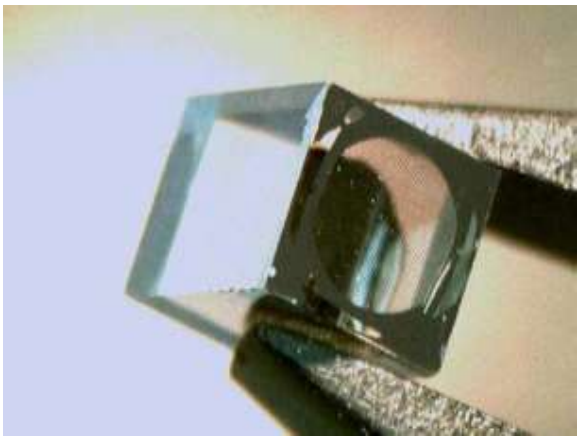


La estructura de la banda de conducción del diamante es similar a la del silicio, con seis «valles» orientados a lo largo de los ejes {100}. Los electrones en estos valles tienen una masa efectiva longitudinal de 1,15 m y una transversal de 0,22 m (donde

m es la masa del electrón), lo que genera una anisotropía fuerte en la propagación del electrón en diferentes orientaciones cristalinas. El intercambio de fonones (vibraciones de la red cristalina) entre los «valles» es llamado dispersión o scattering en inglés. En el diamante la dispersión de fonones entre valles colocados en ejes ortogonales (f-scattering) requiere una energía de 120 meV (valor grande comparado con los 40 meV para el silicio); la dispersión de fonones entre valles colocados en el mismo eje (g-scattering) requiere más energía, unos 165 meV; pero también hay dispersión de fonones dentro de un mismo valle (ac-scattering). Cada uno de estos procesos de dispersión tiene asociada una escala de tiempo diferente. A baja temperatura, unos 77 K, se estima mediante simulaciones de Montecarlo que los eventos de dispersión-f, dispersión-g y dispersión-ac tienen escalas de tiempo de 300 ns, 1 ms y 1 ps (tres escalas de tiempo completamente diferentes). Como el intervalo de tiempo asociado a la recombinación entre bandas es de unos microsegundos, la movilidad de los electrones está dominada a 77 K por la dispersión-f (en silicio se han observado los electrones «valle» pero a una temperatura mucho más baja, la del helio líquido).



El nuevo artículo ha observado electrones polarizados en los «valles» de la banda de conducción en diamante gracias al gran intervalo de relación asociado a la dispersión-f (unos 300 ns). Ello ha permitido propagar estos electrones «valle» en distancias macroscópicas (unos 0,7 mm) y su posterior detección. Estos resultados demuestran la viabilidad de un nuevo tipo de «electrónica» basada en el control de los electrones «valle» utilizando diamantes ultrapuros (en la fotografía de abajo la fina capa de cristal de diamante está montada en un criostato semitransparente y se muestra el contacto eléctrico en malla de Ti/Al).



Valleytronics, otro enfoque emergente, utiliza la respuesta altamente selectiva de materiales cristalinos candidatos en condiciones de iluminación específicas para indicar sus estados de encendido / apagado, es decir, utilizando las estructuras de bandas de los materiales para que la información de 0 y 1 se almacene en valles de energía separados de electrones, que dependen de las estructuras cristalinas de los materiales.

En este nuevo estudio, el equipo de investigación ha demostrado que el sulfuro de estaño II SnS es capaz de absorber diferentes polarizaciones de la luz y luego reemitir selectivamente luz de diferentes colores en diferentes polarizaciones. Esto es útil para acceder simultáneamente a los grados de libertad electrónicos y valleytronic del material, lo que aumentaría sustancialmente la potencia de cálculo y la densidad de almacenamiento de datos de los circuitos hechos con el material.

"Mostramos un nuevo material con valles de energía distintivos que se pueden identificar directamente y controlar por separado", dijo Yao. "Esto es importante porque nos proporciona una plataforma para comprender cómo las firmas de los valles son transportadas por electrones y cómo la información se puede fácilmente almacenados y procesados entre los valles, que son de importancia científica y de ingeniería ".

Lin, el primer autor del artículo, dijo que el material es diferente de los materiales candidatos Valleytronics previamente investigados porque posee tal selectividad a temperatura ambiente sin sesgos adicionales aparte de la fuente de luz de excitación, lo que alivia los requisitos previamente estrictos para controlar los valles. En comparación con sus materiales predecesores, el SnS también es mucho más fácil de procesar.

Con este hallazgo, los investigadores podrán desarrollar dispositivos Valleytronic operativos, que algún día podrán integrarse en circuitos electrónicos. El acoplamiento único entre la luz y los valles en este nuevo material también puede allanar el camino hacia futuros chips híbridos electrónicos / fotónicos.

El efecto Rashba

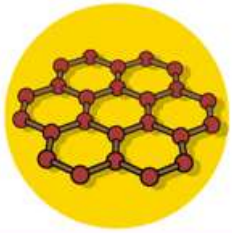
También llamado efecto Bychkov-Rashba , es una división dependiente del momento de las bandas de espín en cristales a granel y sistemas de materia condensada de baja dimensión (como heteroestructuras y estados de superficie) similar a la división de partículas y antipartículas en el Dirac hamiltoniano. La división es un efecto combinado de la interacción espín-órbita y la asimetría del potencial cristalino, en particular en la dirección perpendicular al plano bidimensional (aplicado a superficies y heteroestructuras). Este efecto recibe su nombre en honor a Emmanuel Rashba , quien lo descubrió con Valentin I. Sheka en 1959 para sistemas tridimensionales y luego con Yurii A. Bychkov en 1984 para sistemas bidimensionales. Sorprendentemente, este efecto puede impulsar una amplia variedad de fenómenos físicos novedosos, especialmente la operación de espines de electrones mediante campos eléctricos, incluso cuando se trata de una pequeña corrección de la estructura de banda del estado metálico bidimensional. Un ejemplo de un fenómeno físico que puede explicarse mediante el modelo Rashba es la magnetorresistencia anisotrópica (AMR). Además, los superconductores con gran división de Rashba se sugieren como posibles realizaciones del elusivo estado de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO), fermiones de Majorana y superconductores topológicos de ondas p . Últimamente, se ha realizado un acoplamiento pseudoespín-órbita dependiente del momento en los sistemas de átomos fríos. Efecto Rashba - https://es.xcv.wiki/wiki/Rashba_effect

Fosforeno

Hoy por hoy, el grafeno encabeza la lista de los materiales favoritos de los ingenieros. Formado por capas de carbono de un solo átomo de espesor, exhibe una resistencia y flexibilidad fabulosas y unas propiedades electrónicas únicas. Ello ha propiciado su uso en aplicaciones tan variadas como cargadores para móviles o filtros de agua. Sin embargo, hay un aspecto que aún deja que desear: no es semiconductor. Y aunque se siguen concibiendo nuevas formas de manipularlo a fin de que pueda emplearse para fabricar transistores (los diminutos interruptores internos que hacen funcionar nuestros aparatos electrónicos), hace poco que los investigadores han comenzado a prestar atención a otro material de estructura semejante: el fosforeno, láminas de fósforo negro de un único átomo de grosor

A altas presiones, el fósforo se convierte en fósforo negro, un material con propiedades superconductoras descubierto hace un siglo. En 2014, un equipo de investigadores de la Universidad Purdue logró sintetizar una capa de espesor monoatómico. Desde entonces cada vez más grupos se han volcado a estudiar las propiedades del nuevo material: solo en este año se han publicado más de 400 artículos que lo mencionan.

Según Thomas Szkopek, especialista en materiales bidimensionales de la Universidad McGill, el entusiasmo obedece al potencial del fosforeno para sustituir a otros materiales menos eficientes usados en electrónica. El fósforo negro es un «verdadero semiconductor», señala el Szkopek, en el sentido de que resulta posible activar y desactivar su capacidad para conducir la corriente eléctrica. En particular, puede modificarse cuánta energía fluye por el material a lo largo de muchos órdenes de magnitud. Semejante control ayuda a minimizar la corriente disipada, lo que en principio permitiría fabricar transistores mucho más eficientes que los actuales (la eficiencia de los transistores ordinarios de silicio es en torno a un millón de veces menor que la que impone el límite termodinámico). Con todo, el nuevo material presenta varias características que dificultan su empleo en los transistores. En cualquier caso, si los investigadores no consiguen sortear esas pegas, aún podría tener otros usos. Como es menos frágil que el silicio, resultaría útil en la electrónica flexible. Y, dado que él fósforo emite luz, podría servir para fabricar láseres o leds. Pero tal vez la mejor aplicación del fosforeno se halle en algún dispositivo aún por inventar. «Existe un interés creciente en todo el mundo por los nuevos materiales bidimensionales, ya que ofrecen una combinación de propiedades única», explica Szkopek. De hecho, otras estructuras parecidas esperan su turno: el germaneno, el siliceno y el estaneno ya están a la cola.



PROPIEDAD	FOSFORENO	GRAFENO
Estructura	Hexágono fruncido	Hexágono regular
Conductividad	Fácil de activar o desactivar el paso de la corriente	Fugas de corriente en los interruptores
Flexibilidad	Muy flexible; compresible a causa de su estructura fruncida	Muy flexible
Pureza	Difícil de separar en capas monoatómicas, aunque su calidad seguramente mejorará	Fácil de separar en capas monoatómicas; pocas impurezas
Sensibilidad	Reacciona con la luz, el agua y el aire; en la electrónica de uso cotidiano necesitaría un recubrimiento protector	Estable en condiciones normales; no se necesita un recubrimiento adicional
Otras aplicaciones	Láseres, sensores de *p*H, electrónica flexible	Baterías, pantallas, paneles solares, implantes biónicos

En resumen, la investigación demuestra la posibilidad de usar excitaciones de los vórtices magnéticos para manejar información, abriendo así nuevas alternativas para el desarrollo y la implementación de estos sistemas en la industria de almacenamiento de información.

Cuestionario:

1.- ¿Qué es el spin?

2.- ¿Qué estudia la espintrónica?

3.- ¿Que es la Magnetorresistencia Colosal?

4,- ¿Qué es la magnetorresistencia de efecto túnel?

5.- Magnetic-tunnel transistor:

6.- Investigar que es "Electric dipole spin resonance"

7.- ¿Qué se estudia en la "Magnonica"?

8.- Describir el Efecto Rashba.

9.- Investigar que es Valleytronics (de valley y electronics)

10.- ¿Qué es el Fosforeno?

Debate 45. Origen de la física cuántica

https://youtu.be/prOGjGyXD68

La mecánica cuántica es la rama de la física que estudia la naturaleza a escalas espaciales pequeñas. Los sistemas atómicos y subatómicos, sus interacciones con la radiación electromagnética y otras fuerzas, en términos de cantidades observables. Se basa en la observación de que todas las formas de energía se liberan en unidades discretas o paquetes llamados cuantos. Estos cuantos tienen la característica de pertenecer todos a un grupo específico de bosones, estando cada uno ligado a una interacción fundamental. (Ej: el fotón pertenece a la electromagnética). Sorprendentemente, la teoría cuántica solo permite normalmente cálculos probabilísticos o estadísticos de las características observadas de las partículas elementales, entendidos en términos de funciones de onda. La ecuación

de Schrödinger desempeña el papel en la mecánica cuántica que las leyes de Newton y la conservación de la energía hacen en la mecánica clásica. Es decir, la predicción del comportamiento futuro de un sistema dinámico y es una ecuación de onda en términos de una función de onda la que predice analíticamente la probabilidad precisa de los eventos o resultados.

En teorías anteriores de la física clásica, la energía era tratada únicamente como un fenómeno continuo, en tanto que la materia se supone que ocupa una región muy concreta del espacio y que se mueve de manera continua. Según la teoría cuántica, la energía se emite y se absorbe en cantidades discretas y minúsculas. Un paquete individual de energía, llamado cuanto, en algunas situaciones se comporta como una partícula de materia. Por otro lado, se encontró que las partículas exponen algunas propiedades ondulatorias cuando están en movimiento y ya no son vistas como localizadas en una región determinada, sino más bien extendidas en cierta medida. La luz u otra radiación emitida o absorbida por un átomo solo tiene ciertas frecuencias (o longitudes de onda), como puede verse en la línea del espectro asociado al elemento químico representado por tal átomo. La teoría cuántica demuestra que tales frecuencias corresponden a niveles definidos de los cuantos de luz, o fotones, y es el resultado del hecho de que los electrones del átomo solo pueden tener ciertos valores de energía permitidos. Cuando un electrón pasa de un nivel permitido a otro, una cantidad de energía es emitida o absorbida, cuya frecuencia es directamente proporcional a la diferencia de energía entre los dos niveles.

La mecánica cuántica surge tímidamente en los inicios del siglo xx dentro de las tradiciones más profundas de la física para dar una solución a problemas para los que las teorías conocidas hasta el momento habían agotado su capacidad de explicar, como la llamada catástrofe ultravioleta en la radiación de cuerpo negro predicha por la física estadística clásica y la inestabilidad de los átomos en el modelo atómico de Rutherford. La primera propuesta de un principio propiamente cuántico se debe a Max Planck en 1900, para resolver el problema de la radiación de cuerpo negro, que fue duramente cuestionado, hasta que Albert Einstein lo convierte en el principio que exitosamente pueda explicar el efecto fotoeléctrico. Las primeras formulaciones matemáticas completas de la mecánica cuántica no se alcanzan hasta mediados de la década de 1920, sin que hasta el día de hoy se tenga una interpretación coherente de la teoría, en particular del problema de la medición.

El formalismo de la mecánica cuántica se desarrolló durante la década de 1920. En 1924, Louis de Broglie propuso que, al igual que las ondas de luz presentan propiedades de partículas, como ocurre en el efecto fotoeléctrico, las partículas, también presentan propiedades ondulatorias. Dos formulaciones diferentes de la mecánica cuántica se presentaron después de la sugerencia de Broglie. En 1926, la mecánica ondulatoria de Erwin Schrödinger implica la utilización de una entidad

matemática, la función de onda, que está relacionada con la probabilidad de encontrar una partícula en un punto dado en el espacio. En 1925, la mecánica matricial de Werner Heisenberg no hace mención alguna de las funciones de onda o conceptos similares, pero ha demostrado ser matemáticamente equivalente a la teoría de Schrödinger. Un descubrimiento importante de la teoría cuántica es el principio de incertidumbre, enunciado por Heisenberg en 1927, que pone un límite teórico absoluto en la precisión de ciertas mediciones. Como resultado de ello, la asunción clásica de los científicos de que el estado físico de un sistema podría medirse exactamente y utilizarse para predecir los estados futuros tuvo que ser abandonada. Esto supuso una revolución filosófica y dio pie a numerosas discusiones entre los más grandes físicos de la época.

La mecánica cuántica propiamente dicha no incorpora a la relatividad en su formulación matemática. La parte de la mecánica cuántica que incorpora elementos relativistas de manera formal para abordar diversos problemas se conoce como mecánica cuántica relativista o ya, en forma más correcta y acabada, teoría cuántica de campos (que incluye a su vez a la electrodinámica cuántica, cromodinámica cuántica y teoría electrodébil dentro del modelo estándar) y más generalmente, la teoría cuántica de campos en espacio-tiempo curvo. La única interacción elemental que no se ha podido cuantizar hasta el momento ha sido la interacción gravitatoria. Este problema constituye entonces uno de los mayores desafíos de la física del siglo XXI. La mecánica cuántica se combinó con la teoría de la relatividad en la formulación de Paul Dirac de 1928, lo que, además, predijo la existencia de antipartículas. Otros desarrollos de la teoría incluyen la estadística cuántica, presentada en una forma por Einstein y Bose (la estadística de Bose-Einstein) y en otra forma por Dirac y Enrico Fermi (la estadística de Fermi-Dirac); la electrodinámica cuántica, interesada en la interacción entre partículas cargadas y los campos electromagnéticos, su generalización, la teoría cuántica de campos y la electrónica cuántica.

La mecánica cuántica proporciona el fundamento de la fenomenología del átomo, de su núcleo y de las partículas elementales (lo cual requiere necesariamente el enfoque relativista). También su impacto en teoría de la información, criptografía y química ha sido decisivo entre esta misma.

Contexto histórico

La mecánica cuántica es, cronológicamente hablando, la última de las grandes ramas de la física. Se formuló a principios del siglo xx, casi al mismo tiempo que la teoría de la relatividad, aunque el grueso de la mecánica cuántica se desarrolló a partir de 1920 (siendo la teoría de la relatividad especial de 1905 y la teoría general de la relatividad de 1915).

Además al advenimiento de la mecánica cuántica existían diversos problemas no resueltos en la electrodinámica clásica. El primero de estos problemas era la emisión de radiación de cualquier objeto en equilibrio, llamada radiación térmica, que es la que proviene de la vibración microscópica de las partículas que lo componen. Usando las ecuaciones de la electrodinámica clásica, la energía que emitía esta radiación térmica tendía al infinito, si se suman todas las frecuencias que emitía el objeto, con ilógico resultado para los físicos. También la estabilidad de los átomos no podía ser explicada por el electromagnetismo clásico, y la noción de que el electrón fuera o bien una partícula clásica puntual o bien una cáscara esférica de dimensiones finitas resultaban igualmente problemáticas para esto.

Radiación electromagnética

El problema de la radiación electromagnética de un cuerpo negro fue uno de los primeros problemas resueltos en el seno de la mecánica cuántica. Es en el seno de la mecánica estadística donde surgen por primera vez las ideas cuánticas en 1900. Al físico alemán Max Planck se le ocurrió un artificio matemático: si en el proceso aritmético se sustituía la integral de esas frecuencias por una suma no continua (discreta), se dejaba de obtener infinito como resultado, con lo que se eliminaba el problema; además, el resultado obtenido concordaba con lo que después era medido.

Fue Max Planck quien entonces enunció la hipótesis de que la radiación electromagnética es absorbida y emitida por la materia en forma de «cuantos» de luz o fotones de energía cuantizados introduciendo una constante estadística, que se denominó constante de Planck. Su historia es inherente al siglo xx, ya que la primera formulación cuántica de un fenómeno fue dada a conocer por el mismo Planck el 14 de diciembre de 1900 en una sesión de la Sociedad Física de la Academia de Ciencias de Berlín.

La idea de Planck habría permanecido muchos años solo como hipótesis sin verificar por completo si Albert Einstein no la hubiera retomado, proponiendo que la luz, en ciertas circunstancias, se comporta como partículas de energía (los cuantos de luz o fotones) en su explicación del efecto fotoeléctrico. Fue Albert Einstein quien completó en 1905 las correspondientes leyes del movimiento su teoría especial de la relatividad, demostrando que el electromagnetismo era una teoría esencialmente no mecánica. Culminaba así lo que se ha dado en llamar física clásica, es decir, la física no-cuántica.

Usó este punto de vista llamado por él «heurístico», para desarrollar su teoría del efecto fotoeléctrico, publicando esta hipótesis en 1905, lo que le valió el Premio Nobel de Física de 1921. Esta hipótesis fue aplicada también para proponer una teoría sobre el calor específico, es decir, la que resuelve cuál es la cantidad de calor

necesaria para aumentar en una unidad la temperatura de la unidad de masa de un cuerpo.

El siguiente paso importante se dio hacia 1925, cuando Louis De Broglie propuso que cada partícula material tiene una longitud de onda asociada, inversamente proporcional a su masa, y a su velocidad. Así quedaba establecida la dualidad onda/materia. Poco tiempo después Erwin Schrödinger formuló una ecuación de movimiento para las «ondas de materia», cuya existencia había propuesto De Broglie y varios experimentos sugerían que eran reales.

La mecánica cuántica introduce una serie de hechos contraintuitivos que no aparecían en los paradigmas físicos anteriores; con ella se descubre que el mundo atómico no se comporta como esperaríamos. Los conceptos de incertidumbre o cuantización son introducidos por primera vez aquí. Además la mecánica cuántica es la teoría científica que ha proporcionado las predicciones experimentales más exactas hasta el momento, a pesar de estar sujeta a las probabilidades.

Inestabilidad de los átomos clásicos

El segundo problema importante que la mecánica cuántica resolvió a través del modelo de Bohr, fue el de la estabilidad de los átomos. De acuerdo con la teoría clásica un electrón orbitando alrededor de un núcleo cargado positivamente debería emitir energía electromagnética perdiendo así velocidad hasta caer sobre el núcleo. La evidencia empírica era que esto no sucedía, y sería la mecánica cuántica la que resolvería este hecho primero mediante postulados ad hoc formulados por Bohr y más tarde mediante modelos como el modelo atómico de Schrödinger basados en supuestos más generales. A continuación se explica el fracaso del modelo clásico.

En mecánica clásica, un átomo de hidrógeno es un tipo de problema de los dos cuerpos en que el protón sería el primer cuerpo que tiene más del 99% de la masa del sistema y el electrón es el segundo cuerpo que es mucho más ligero. Para resolver el problema de los dos cuerpos es conveniente hacer la descripción del sistema, colocando el origen del sistema de referencia en el centro de masa de la partícula de mayor masa, esta descripción es correcta considerando como masa de la otra partícula la masa reducida que viene dada por

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx 0,999 m_e$$

Siendo m_p a masa del protón y m_e la masa del electrón. En ese caso el problema del átomo de hidrógeno parece admitir una solución simple en la que el electrón se moviera en órbitas elípticas alrededor del núcleo atómico. Sin embargo, existe un problema con la solución clásica, de acuerdo con las predicciones de electromagnetismo partícula eléctrica que sigue un movimiento acelerado, como

sucedería al describir una elipse debería emitir radiación electromagnética, y por tanto perder energía cinética, la cantidad de energía radiada sería de hecho:

$$\frac{dE_r}{dt} = \frac{e^2 a^2 \gamma^4}{6\pi\epsilon_0 c^3} \approx \frac{\pi}{96} \frac{e^{14} m_e^2 \gamma^4}{\epsilon_0^7 h^8 c^3} \geq 5,1 \cdot 10^{-8} \text{watt}$$

Ese proceso acabaría con el colapso del átomo sobre el núcleo en un tiempo muy corto dadas las grandes aceleraciones existentes. A partir de los datos de la ecuación anterior el tiempo de colapso sería de 10-8 s, es decir, de acuerdo con la física clásica los átomos de hidrógeno no serían estables y no podrían existir más de una cienmillonésima de segundo.

Esa incompatibilidad entre las predicciones del modelo clásico y la realidad observada llevó a buscar un modelo que explicara fenomenológicamente el átomo. El modelo atómico de Bohr era un modelo fenomenológico y provisorio que explicaba satisfactoriamente aunque de manera heurística algunos datos, como el orden de magnitud del radio atómico y los espectros de absorción del átomo, pero no explicaba cómo era posible que el electrón no emitiera radiación perdiendo energía. La búsqueda de un modelo más adecuado llevó a la formulación del modelo atómico de Schrödinger en el cual puede probarse que el valor esperado de la aceleración es nulo, y sobre esa base puede decirse que la energía electromagnética emitida debería ser también nula. Sin embargo, al contrario del modelo de Bohr, la representación cuántica de Schrödinger es difícil de entender en términos intuitivos.

Desarrollo histórico

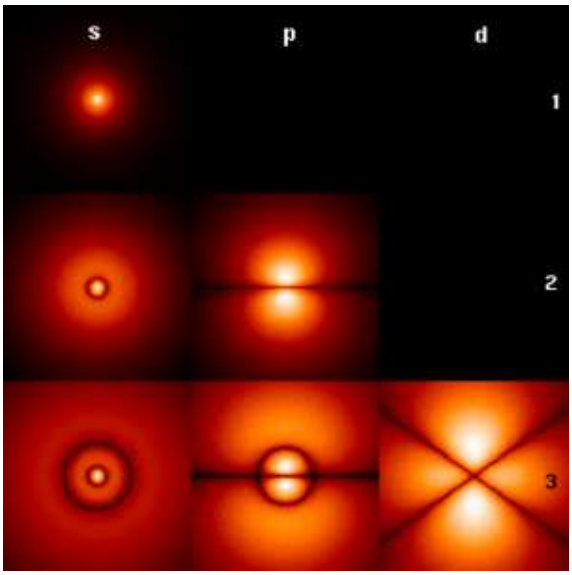


Fig. 1: La función de onda del electrón de un átomo de hidrógeno posee niveles de energía definidos y discretos denotados por un número cuántico n=1, 2, 3,... y valores definidos de momento angular caracterizados por la notación: s, p, d,... Las áreas brillantes en la figura corresponden a densidades elevadas de probabilidad de encontrar el electrón en dicha posición.

La teoría cuántica fue desarrollada en su forma básica a lo largo de la primera mitad del siglo xx. El hecho de que la energía se intercambie de forma discreta se puso de relieve por hechos experimentales como los siguientes, inexplicables con las herramientas teóricas anteriores de la mecánica clásica o la electrodinámica:

Espectro de la radiación del cuerpo negro, resuelto por Max Planck con la cuantización de la energía. La energía total del cuerpo negro resultó que tomaba valores discretos más que continuos. Este fenómeno se llamó cuantización, y los intervalos posibles más pequeños entre los valores discretos son llamados quanta (singular: quantum, de la palabra latina para «cantidad», de ahí el nombre de mecánica cuántica). La magnitud de un cuanto es un valor fijo llamado constante de Planck, y que vale: 6.626 ×10-34 julios por segundo.

Bajo ciertas condiciones experimentales, los objetos microscópicos como los átomos o los electrones exhiben un comportamiento ondulatorio, como en la interferencia. Bajo otras condiciones, las mismas especies de objetos exhiben un comportamiento corpuscular, de partícula, («partícula» quiere decir un objeto que puede ser localizado en una región concreta del espacio), como en la dispersión de partículas. Este fenómeno se conoce como dualidad onda-partícula.

Las propiedades físicas de objetos con historias asociadas pueden ser correlacionadas, en una amplitud prohibida para cualquier teoría clásica, solo pueden ser descritos con precisión si se hace referencia a ambos a la vez. Este fenómeno es llamado entrelazamiento cuántico y la desigualdad de Bell describe su diferencia con la correlación ordinaria. Las medidas de las violaciones de la desigualdad de Bell fueron algunas de las mayores comprobaciones de la mecánica cuántica.

Explicación del efecto fotoeléctrico, dada por Albert Einstein, en que volvió a aparecer esa "misteriosa" necesidad de cuantizar la energía.

Efecto Compton.

El desarrollo formal de la teoría fue obra de los esfuerzos conjuntos de varios físicos y matemáticos de la época como Schrödinger, Heisenberg, Einstein, Dirac, Bohr y Von Neumann entre otros (la lista es larga). Algunos de los aspectos fundamentales de la teoría están siendo aún estudiados activamente. La mecánica cuántica ha sido también adoptada como la teoría subyacente a muchos campos de la física y la química, incluyendo la física de la materia condensada, la química cuántica y la física de partículas.

La región de origen de la mecánica cuántica puede localizarse en la Europa central, en Alemania y Austria, y en el contexto histórico del primer tercio del siglo xx.

Suposiciones más importantes

- Las suposiciones más importantes de esta teoría son las siguientes:
- Al ser imposible fijar a la vez la posición y el momento de una partícula, se renuncia al concepto de trayectoria, vital en la mecánica clásica. En vez de eso, el movimiento de una partícula puede ser explicado por una función matemática que asigna, a cada punto del espacio y a cada instante, la probabilidad de que la partícula descrita se halle en tal posición en ese instante (al menos, en la interpretación de la Mecánica cuántica más usual, la probabilística o interpretación de Copenhague). A partir de esa función, o función de ondas, se extraen teóricamente todas las magnitudes del movimiento necesarias.
- Existen dos tipos de evolución temporal, si no ocurre ninguna medida el estado del sistema o función de onda evolucionan de acuerdo con la ecuación de Schrödinger, sin embargo, si se realiza una medida sobre el sistema, este sufre un «salto cuántico» hacia un estado compatible con los valores de la medida obtenida (formalmente el nuevo estado será una proyección ortogonal del estado original).
- Existen diferencias notorias entre los estados ligados y los que no lo están.
- La energía no se intercambia de forma continua en un estado ligado, sino en forma discreta lo cual implica la existencia de paquetes mínimos de energía llamados cuantos, mientras en los estados no ligados la energía se comporta como un continuo.

Interpretación de Copenhague

Para describir la teoría de forma general es necesario un tratamiento matemático riguroso, pero aceptando una de las tres interpretaciones de la mecánica cuántica (a partir de ahora la Interpretación de Copenhague), el marco se relaja. La mecánica cuántica describe el estado instantáneo de un sistema (estado cuántico) con una función de onda que codifica la distribución de probabilidad de todas las propiedades medibles, u observables. Algunos observables posibles sobre un sistema dado son la energía, posición, momento y momento angular. La mecánica cuántica no asigna valores definidos a los observables, sino que hace predicciones sobre sus distribuciones de probabilidad. Las propiedades ondulatorias de la materia son explicadas por la interferencia de las funciones de onda.

Estas funciones de onda pueden variar con el transcurso del tiempo. Esta evolución es determinista si sobre el sistema no se realiza ninguna medida aunque esta evolución es estocástica y se produce mediante colapso de la función de onda cuando se realiza una medida sobre el sistema (Postulado IV de la MC). Por ejemplo, una partícula moviéndose sin interferencia en el espacio vacío puede ser

descrita mediante una función de onda que es un paquete de ondas centrado alrededor de alguna posición media. Según pasa el tiempo, el centro del paquete puede trasladarse, cambiar, de modo que la partícula parece estar localizada más precisamente en otro lugar. La evolución temporal determinista de las funciones de onda es descrita por la ecuación de Schrödinger.

Algunas funciones de onda describen estados físicos con distribuciones de probabilidad que son constantes en el tiempo, estos estados se llaman estacionarios, son estados propios del operador hamiltoniano y tienen energía bien definida. Muchos sistemas que eran tratados dinámicamente en mecánica clásica son descritos mediante tales funciones de onda estáticas. Por ejemplo, un electrón en un átomo sin excitar se dibuja clásicamente como una partícula que rodea el núcleo, mientras que en mecánica cuántica es descrito por una nube de probabilidad estática que rodea al núcleo.

Cuando se realiza una medición en un observable del sistema, la función de ondas se convierte en una del conjunto de las funciones llamadas funciones propias o estados propios del observable en cuestión. Este proceso es conocido como colapso de la función de onda. Las probabilidades relativas de ese colapso sobre alguno de los estados propios posibles son descritas por la función de onda instantánea justo antes de la reducción. Considerando el ejemplo anterior sobre la partícula en el vacío, si se mide la posición de la misma, se obtendrá un valor impredecible x. En general, es imposible predecir con precisión qué valor de x se obtendrá, aunque es probable que se obtenga uno cercano al centro del paquete de ondas, donde la amplitud de la función de onda es grande. Después de que se ha hecho la medida, la función de onda de la partícula colapsa y se reduce a una que esté muy concentrada en torno a la posición observada x.

La ecuación de Schrödinger es en parte determinista en el sentido de que, dada una función de onda a un tiempo inicial dado, la ecuación suministra una predicción concreta de qué función tendremos en cualquier tiempo posterior. Durante una medida, el origen-estado al cual colapsa la función es probabilista y en este aspecto es no determinista. Así que la naturaleza probabilística de la mecánica cuántica nace del acto de la medida.

Formulación matemática

En la formulación matemática rigurosa, desarrollada por Dirac y von Neumann, los estados posibles de un sistema cuántico están representados por vectores unitarios (llamados estados) que pertenecen a un Espacio de Hilbert complejo separable (llamado el espacio de estados). Qué tipo de espacio de Hilbert es necesario en cada caso depende del sistema; por ejemplo, el espacio de estados para los estados de posición y momento es el espacio de funciones de cuadrado integrable ,

mientras que la descripción de un sistema sin traslación pero con un espín es el espacio . La evolución temporal de un estado cuántico queda descrita por la ecuación de Schrödinger, en la que el hamiltoniano, el operador correspondiente a la energía total del sistema, tiene un papel central.

Cada magnitud observable queda representada por un operador lineal hermítico definido sobre un dominio denso del espacio de estados. Cada estado propio de un observable corresponde a un eigenvector del operador, y el valor propio o eigenvalor asociado corresponde al valor del observable en aquel estado propio. El espectro de un operador puede ser continuo o discreto. La medida de un observable representado por un operador con espectro discreto solo puede tomar un conjunto numerable de posibles valores, mientras que los operadores con espectro continuo presentan medidas posibles en intervalos reales completos. Durante una medida, la probabilidad de que un sistema colapse a uno de los eigenestados viene dada por el cuadrado del valor absoluto del producto interno entre el estado propio o auto-estado (que podemos conocer teóricamente antes de medir) y el vector estado del sistema antes de la medida. Podemos así encontrar la distribución de probabilidad de un observable en un estado dado computando la descomposición espectral del operador correspondiente. El principio de incertidumbre de Heisenberg se representa por la aseveración de que los operadores correspondientes a ciertos observables no conmutan.

Aplicaciones

En muchos aspectos, la tecnología moderna opera a una escala en la que los efectos cuánticos son significativos. Las aplicaciones importantes de la teoría cuántica incluyen la química cuántica, la óptica cuántica, la computación cuántica, los imanes superconductores, los diodos emisores de luz, el amplificador óptico y el láser, el transistor y semiconductores como el microprocesador, imágenes médicas y de investigación como la resonancia magnética y el microscopio electrónico. Las explicaciones de muchos fenómenos biológicos y físicos tienen su origen en la naturaleza del enlace químico, sobre todo la macromolécula del ADN.

Relatividad y la mecánica cuántica

El mundo moderno de la física se funda notablemente en dos teorías principales, la relatividad general y la mecánica cuántica, aunque ambas teorías usan principios aparentemente incompatibles. Los postulados que definen la teoría de la relatividad de Einstein y la teoría del quántum están apoyados por rigurosa y repetida evidencia empírica. Sin embargo, ambas se resisten a ser incorporadas dentro de un mismo modelo coherente. Desde mediados del siglo xx, aparecieron teorías cuánticas relativistas del campo electromagnético (electrodinámica cuántica) y las fuerzas nucleares (modelo electrodébil, cromodinámica cuántica), pero no se tiene una teoría cuántica relativista del campo gravitatorio que sea plenamente consistente y

válida para campos gravitatorios intensos (existen aproximaciones en espacios asintóticamente planos). Todas las teorías cuánticas relativistas consistentes usan los métodos de la teoría cuántica de campos.

En su forma ordinaria, la teoría cuántica abandona algunos de los supuestos básicos de la teoría de la relatividad, como por ejemplo el principio de localidad usado en la descripción relativista de la causalidad. El mismo Einstein había considerado absurda la violación del principio de localidad a la que parecía abocar la mecánica cuántica. La postura de Einstein fue postular que la mecánica cuántica si bien era consistente era incompleta. Para justificar su argumento y su rechazo a la falta de localidad y la falta de determinismo, Einstein y varios de sus colaboradores postularon la llamada paradoja de Einstein-Podolsky-Rosen (EPR), la cual demuestra que medir el estado de una partícula puede instantáneamente cambiar el estado de su socio enlazado, aunque las dos partículas pueden estar a una distancia arbitrariamente grande. Modernamente el paradójico resultado de la paradoja EPR se sabe es una consecuencia perfectamente consistente del llamado entrelazamiento cuántico. Es un hecho conocido que si bien la existencia del entrelazamiento cuántico efectivamente viola el principio de localidad, en cambio no viola la causalidad definida en términos de información, puesto que no hay transferencia posible de información. Si bien en su tiempo, parecía que la paradoja EPR suponía una dificultad empírica para mecánica cuántica, y Einstein consideró que la mecánica cuántica en la interpretación de Copenhague podría ser descartada por experimento, décadas más tarde los experimentos de Alain Aspect (1981) revelaron que efectivamente la evidencia experimental parece apuntar en contra del principio de localidad. Y por tanto, el resultado paradójico que Einstein rechazaba como «sin sentido» parece ser lo que sucede precisamente en el mundo real.

Cuestionario:

1.-¿ Qué estudia la Mecánica cuántica?

2.- Diferencias entre Física Cuántica y Mecánica Cuántica

3.- ¿Qué es el entrelazamiento cuántico?

4.- ¿Que establece la Interpretación de Copenhague?

5.- ¿En qué consisten los experimentos de Alain Aspect?