

MODULO I

MECANICA CUANTICA

PARTE I :

LAS EXPERIENCIAS CONFLICTIVAS

MECANICA CUANTICA

PARTE I : LAS EXPERIENCIAS CONFLICTIVAS

INTRODUCCION

Física Clásica y Física Cuántica

EXPERIENCIAS CONFLICTIVAS

Radiación del cuerpo negro: un problema tecnológico

La radiación del cuerpo negro y el cuanto de Planck

Formulación de Rayleigh - Jeans

Hipótesis de Planck

El efecto fotoeléctrico

Einstein y la interpretación del efecto fotoeléctrico

La radiación electromagnética,... ¿onda o corpúsculo?

El Efecto Compton

Explicación de Compton

Algo más a partir de Compton.....

Regularidades en los espectros atómicos

El lenguaje de los espectros

Las series espectrales del hidrógeno

Las series espectrales: un enigma pendiente

INTRODUCCION

Física Clásica y Física Cuántica

La Física Clásica nos muestra el universo como análogo a un inmenso mecanismo susceptible de ser descrito con absoluta precisión por la localización de sus partes en el espacio y su modificación en el decurso del tiempo, mecanismo cuya evolución, en principio puede ser prevista con rigurosa exactitud cuando se posee cierto número de datos acerca de su estado inicial.

Louis De Broglie

¿ Qué implicancias tiene esta afirmación del célebre físico de nuestro siglo?

Supongamos un sistema físico, por ejemplo, una partícula. En un instante de tiempo $t=t_0$, se puede establecer el estado físico del sistema. Es así como, en el contexto de la Física Clásica, podemos decir que la partícula, en un instante determinado tiene asociado un estado caracterizado por los valores que asumen su velocidad, su momento lineal, su energía... Los valores v_0 , p_0 , E_0 , por ejemplo, asociados al t_0 , van a definir lo que llamamos el **estado del sistema** en ese instante.

Del mismo modo, si conocemos el estado inicial, asociado al instante t_0 , la Física Clásica nos permite determinar con exactitud los valores asumidos por las variables de estado en un instante t_1 posterior, valores que se suceden con continuidad. Así, la partícula caracterizada por (x_0, p_0) en $t=t_0$ y por (x_1, p_1) en $t=t_1$, pasa por todos los valores intermedios de x y p entre t_0 y t_1 .

Esta posibilidad de previsión rigurosa de los fenómenos futuros a partir de los fenómenos actuales, posibilidad que implica que el porvenir está contenido en cierto modo en el presente y que no le añade nada, constituye lo que se ha dado en llamar el **determinismo clásico**.

Hasta aproximadamente el año 1900, todos los fenómenos físicos que se estudiaban podían describirse dentro del marco de la Física Clásica. En particular, para la comprensión de las propiedades electrónicas de los materiales, las descripciones empleadas hasta entonces respondían a enfoques fenomenológicos basados en observaciones experimentales. Las leyes halladas en este campo de la Física fueron obtenidas a partir de magnitudes y de relaciones entre magnitudes de tipo macroscópicas. Ninguna hipótesis relativa a la estructura de la materia fue necesario realizar para formular las ecuaciones que describían dichos fenómenos.

Esos resultados hallados empíricamente conservan su campo de aplicación, tal el caso de la ley de Ohm, las ecuaciones de Maxwell, cuando intervienen magnitudes tales como diferencias de potencial, intensidades de corriente, entre otras. Sin embargo, cuando se busca explicar fenómenos de naturaleza microscópica, tales como interacciones de tipo electrón- sólido, por ejemplo, se ponen de manifiesto las limitaciones del enfoque clásico. Puesto que para la comprensión de la física de los electrones y de los dispositivos tecnológicos asociados debemos encarar el estudio de la

materia a partir de su estructura, el enfoque clásico se nos presenta insuficiente.

Es en 1901, a raíz de un hallazgo de Planck, que se inicia un gran cambio en el campo de la Física. Esta es la época en la que eran objeto de estudio en las comunidades científicas, los fenómenos en los que las radiaciones electromagnéticas aparecían asociadas con la materia, tanto en mecanismos de emisión como de absorción; época en la que se buscaba, a través del estudio de la estructura de la materia, dar explicación a fenómenos experimentales que no podían ser descriptos a través de la Física Clásica. Podría afirmarse que existían, por entonces, una serie de **problemas y experiencias conflictivas** que desafiaban a la comunidad científica. Entre todos ellos, podemos destacar: la radiación del cuerpo negro, el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton, los espectros de emisión y absorción de distintos gases

El análisis y explicación de estas experiencias, las que involucran mecanismos en los que entran en juego tanto la radiación como la materia asociados a procesos de absorción o emisión, permitirá comprender el modo en que, en las primeras décadas de este siglo, se fuera generando un nuevo modo de pensamiento, origen de la **Física Cuántica**.

EXPERIENCIAS CONFLICTIVAS

Radiación del cuerpo negro: un problema tecnológico

Este problema está vinculado a la medición óptica de temperaturas.

A principios de siglo, cuando se necesitaba medir una temperatura, se empleaban métodos basados en la dilatometría, ya sea por el empleo de un termómetro, o la medición a través de la elongación por dilatación de una varilla o de un fleje metálico.

Estos métodos se volvían problemáticos o imposibles a temperaturas elevadas, fundamentalmente debido a la pérdida de linealidad de la elongación de los metales con la temperatura.

$$\Delta l = l - l_0 = \alpha \Delta T + \beta \Delta T^2 + \dots$$

Un método alternativo, (sólo válido, en ese entonces, para temperaturas elevadas), consistía en observar el color de la luz emitida por una sustancia u objeto que estuviera a alta temperatura.

De la experiencia se conocía que cuando se observaba un objeto dentro de un horno, **este objeto y las paredes internas del horno**, iban adquiriendo, a temperaturas mayores a 450 °C, un color rosado que, a

medida que la temperatura subía, se convertía en rojizo, luego en rojo, posteriormente en amarillo, pasando al blanco amarillento y finalmente al blanco azulado.

Este fenómeno permitía realizar una escala color - temperatura, lográndose por este método una medición aproximada de la temperatura.

Al estudio del modelo físico - matemático de este fenómeno, para la comprensión de la correlación color - temperatura, se lo conoce como el estudio de la radiación del cuerpo negro.

La radiación del cuerpo negro y el cuanto de Planck

El origen de la teoría de los cuantos se encuentra en las investigaciones hechas hacia 1900 por Max Planck sobre la teoría de la radiación del cuerpo negro.

En la naturaleza no existen estrictamente **cuerpos negros**. Este concepto físico es una abstracción teórica construida como necesidad para el estudio de esos fenómenos asociados al comportamiento de los hornos. Tal como “la partícula” y “el rayo luminoso”, el cuerpo negro es, desde el punto de vista del estudio físico-matemático, una representación idealizada de determinados sistemas reales.

Desde una perspectiva científica., ¿qué es un cuerpo negro?

Para su definición resulta conveniente revisar algunos conceptos vinculados con la **radiación del calor**.

Podemos caracterizar la intensidad de la radiación de calor mediante el flujo de energía medido en vatios. El flujo de energía emitido por la unidad de superficie del cuerpo emisor en todas direcciones, se denomina **emitancia luminosa** del cuerpo. Designamos esta magnitud con la letra U. La emitancia luminosa es una función de la temperatura.

Puesto que la radiación se compone de ondas de diferentes frecuencias ω , si quisiéramos determinar el flujo de energía radiante emitido por un cuerpo a una determinada temperatura, U_T , deberíamos conocer su **poder emisivo** (ϵ_ω) a esa temperatura, para cada frecuencia, e integrarlo a lo largo de todo el espectro de frecuencias.

Así,
$$U_T = \int_0^\infty \epsilon_{\omega T} d\omega$$

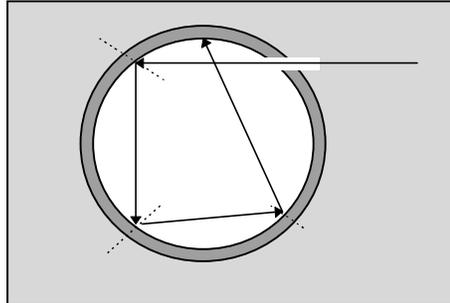
Por otra parte, si analizamos la absorción por un cuerpo del flujo de energía radiante provocado por ondas electromagnéticas, veremos que del total incidente, una parte es absorbida por el mismo. La relación entre la absorbida y la incidente es lo que se

denomina **capacidad de absorción** del cuerpo, la cual es, al igual que el poder emisor, una función de la temperatura y de la frecuencia de la radiación incidente. Por definición, la capacidad de absorción (α), no puede ser mayor que la unidad.

Para el cuerpo que absorbe completamente la radiación de todas las frecuencias que inciden sobre él, $\alpha \equiv 1$. **Este cuerpo se denomina cuerpo negro.**

Una cavidad provista de un pequeño orificio se comporta como un **cuerpo negro**.

La radiación que penetra hacia el interior a través del orificio, antes de salir del mismo, sufre una reflexión repetida. Parte de la energía es absorbida en cada reflexión, como resultado de lo cual toda la radiación de cualquier frecuencia se absorbe en esa cavidad.



Por esa misma razón, el interior de una habitación en un día soleado parece oscuro, al ser observado desde lejos a través de una ventana abierta

Un horno se comporta como un cuerpo negro. Cualquier radiación que choque contra el pequeño orificio de un horno tiene prácticamente cero probabilidades de ser reflejada en la dirección inversa. Además la radiación en el interior del horno está en equilibrio para cada temperatura y cualquier radiación que proceda del orificio es característica del cuerpo negro a esa temperatura.

Existe una relación entre el poder emisor y la capacidad de absorción de cualquier cuerpo, fundamentada a través del concepto de equilibrio térmico: **aquel cuerpo que emita más energía, deberá absorber más.**

Esta relación expresa una ley establecida por Kirchoff: **La relación entre el poder emisor y la capacidad de absorción no depende de la naturaleza del cuerpo, sino que para todos los cuerpos es una misma función universal de la frecuencia y de la temperatura.**

$$\epsilon(\omega, T) / \alpha(\omega, T) = f(\omega, T)$$

El poder emisor y la capacidad de absorción pueden variar extraordinariamente al pasar de un cuerpo a otro; pero la relación entre ellos será igual para todos los cuerpos. Para el

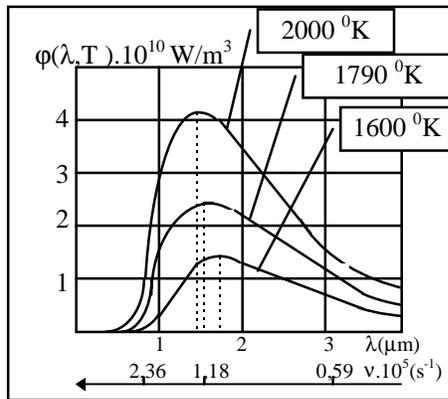
cuerpo negro, $\alpha(\omega, T) \equiv 1$ por definición. Por consiguiente, de la relación anterior, se infiere que la función universal de Kirchoff $f(\omega, T)$ representa el poder emisivo del cuerpo negro teórico.

Si mantenemos las paredes de la cavidad (o del horno), a cierta temperatura T , del orificio saldrá una radiación bastante cercana por su composición espectral a la del cuerpo negro teórico a esa misma temperatura. Al descomponer esa radiación en un espectro con ayuda de una red de difracción y medir la intensidad de las diferentes zonas del mismo en función de las longitudes de onda, puede determinarse experimentalmente el aspecto de la $f(\omega, T)$ y de su equivalente $\phi(\lambda, T)$. (Recuérdese que λ y ω están relacionadas por la velocidad de la luz como $\lambda = 2\pi c/\nu$).

A partir de estos resultados se han determinado varias relaciones. Las distintas curvas se refieren a diferentes valores de la temperatura T del cuerpo negro:

- ◆ Es posible observar que el máximo del poder emisivo se desplaza hacia el lado de las ondas más cortas al aumentar la temperatura. Así, la longitud de onda a la cual se produce el máximo de las curvas, se desplaza hacia el azul a medida que se aumenta la temperatura del horno. Esto concuerda con la observación común que un horno caliente al blanco estará a mayor temperatura que uno al rojo. La ley experimental que describe este comportamiento fue hallada por Wien y expresa:

Ley de Wien : $\lambda_{\text{máx}} \cdot T = \text{cte.}$



A partir de las curvas, se deriva también que:

- ◆ el flujo de energía emitido por la unidad de superficie del cuerpo emisor en todas las direcciones dentro de la cavidad, o emitancia luminosa, (área bajo cada curva de la distribución espectral), aumenta fuertemente con la temperatura.

Se formuló entonces una segunda relación, la ley de Stefan - Boltzmann, en un esfuerzo por describir estas curvas. Esta ley establece que la emitancia luminosa del cuerpo negro es proporcional a la cuarta potencia de la temperatura absoluta:

Ley de Stefan-Boltzmann : $U \equiv \int_0^{\infty} f(\omega, T) d(\omega) = \sigma \cdot T^4$

Donde σ se denomina constante de Stefan - Boltzmann, cuyo valor experimental es $5,7 \cdot 10^{-8} \text{ W / (m}^2 \cdot \text{K}^4)$.

Formulación de Rayleigh - Jeans

Las leyes de Stefan - Boltzmann y de Wien dan, sobre la composición de la radiación del cuerpo negro y sobre sus modificaciones en función de la temperatura, datos muy importantes que la experiencia ha verificado perfectamente, pero no fijan de un modo completo la forma de la ley de la repartición espectral. Inmediatamente resultó que no se podía avanzar no teniendo en cuenta más que consideraciones termodinámicas, y que, para determinar completamente la forma de la ley de composición espectral, había que introducir hipótesis sobre la manera cómo la materia emite y absorbe la radiación, y que había por lo tanto que aventurarse en el terreno de las hipótesis atómicas abandonando el terreno más sólido de la Termodinámica.

Para ello se propusieron distintas relaciones, pero sólo una, la formulación de Rayleigh-Jeans, tenía base teórica.

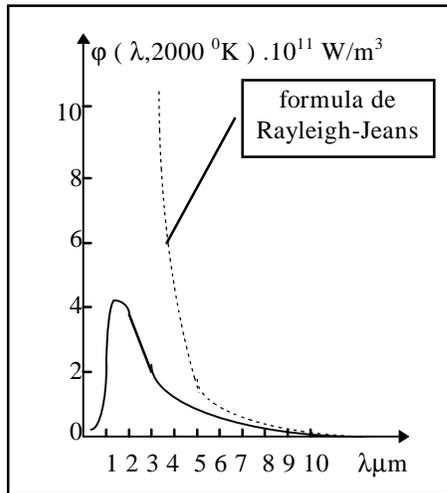
En base a un razonamiento clásico, se reconoció que la radiación proveniente del horno (cuerpo negro) era emitida por los átomos calientes de las paredes. En virtud de que se conocía que las cargas en oscilación en una antena o dipolo podrían emitir radiación electromagnética, esta hipótesis fue natural. En particular se pensó que los átomos podrían tratarse como dipolos oscilantes con diferentes frecuencias de oscilación.

Al estudiar el equilibrio que se establece en un recinto isoterma como consecuencia de los intercambios de energía entre los osciladores y la radiación ambiente según los métodos del Electromagnetismo Clásico, se pudo hallar una ley de repartición espectral:

$$f(\omega, T) = \text{cte} \cdot \omega^2 \cdot \langle \epsilon \rangle ;$$

siendo la cantidad $\langle \epsilon \rangle$ la energía promedio del dipolo oscilante igual a KT y calculada mediante la expresión:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \epsilon \cdot e^{-\epsilon/KT} d\epsilon}{\int_0^{\infty} e^{-\epsilon/KT} d\epsilon}$$



Tal como se puede observar en la figura, ésta concuerda satisfactoriamente con los datos experimentales sólo para longitudes de onda muy largas y diverge considerablemente del experimento para longitudes de onda cortas. La relación señala que la curva debería aumentar sin límite a medida que λ se hace más pequeña. Vimos, sin embargo, que la curva experimental alcanza un máximo en algún valor de λ y a continuación disminuye hacia cero a medida que λ disminuye.

Esta falla de la ley de Rayleigh - Jeans a longitudes de onda corta se denominó "catástrofe ultravioleta", en virtud de que la falla ocurre en las longitudes de onda ultravioletas y más cortas. La densidad total de la energía de la radiación del cuerpo negro obtenido en base a la ley de Rayleigh debería ser infinita a toda temperatura.

Sin embargo, desde el punto de vista clásico, la deducción de la fórmula de Rayleigh - Jeans es irreprochable. Por esta razón, la divergencia de esta fórmula del experimento indica la existencia de regularidades incompatibles con las concepciones de la Física Clásica.

Hipótesis de Planck

Uno de los físicos que estaba trabajando en la búsqueda de un marco teórico explicativo para la radiación del cuerpo negro fue Max Planck. Ya había desarrollado una relación empírica que describía con éxito la información experimental de la curva de la distribución espectral de la energía de la radiación del cuerpo negro. Examinando los resultados de la ley de Rayleigh, Planck pudo advertir que la inexactitud procedía del papel demasiado importante que desempeñan en la imagen clásica de los intercambios de energía entre los osciladores atómicos y la radiación, los osciladores de alta frecuencia. Esto era lo que conducía al crecimiento monótono de la densidad espectral con la frecuencia, la llamada catástrofe ultravioleta.

Con el objeto de restringir el papel de los osciladores de alta frecuencia, Planck introdujo en su descripción un elemento extraño a las concepciones clásicas. Postuló que **la materia no puede emitir energía radiante más que por cantidades finitas (cuantos de energía) proporcionales a la frecuencia de la radiación.** De este modo resulta:

$$\text{cuanto de energía} \quad \epsilon = h \cdot \nu$$

Si la radiación se emite en porciones ϵ , su energía deberá ser múltiplo de esa magnitud. La energía emitida por los osciladores atómicos como radiación electromagnética puede tomar entonces sólo ciertos valores permitidos: 0ϵ , 1ϵ , 2ϵ , 3ϵ , y así sucesivamente.

Genéricamente: $\epsilon_n = n \cdot \epsilon = n \cdot h \cdot \nu$; con $n = 0, 1, 2, \dots$

A partir de los datos experimentales Planck calculó el factor de proporcionalidad, h , de valor $6.64 \cdot 10^{-34}$ J / s, conocido actualmente como constante de Planck.

Poniendo en juego esta hipótesis de la cuantificación de la energía de los osciladores atómicos, Planck encontró una ley de repartición espectral de la radiación del cuerpo negro que reproduce la curva experimental.

$$f(\omega, T) = \text{cte} \cdot \omega^2 \cdot \langle \epsilon \rangle$$

siendo la cantidad $\langle \epsilon \rangle$ la energía promedio de los osciladores atómicos, ahora de un valor diferente del KT que resultaba en la fórmula de Rayleigh. A partir de esta hipótesis de cuantización de la energía de los osciladores, en el cálculo de la $\langle \epsilon \rangle$ Planck reemplaza la expresión:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \epsilon \cdot e^{-\epsilon/KT} d\epsilon}{\int_0^{\infty} e^{-\epsilon/KT} d\epsilon} \quad \text{por: } \langle \epsilon \rangle = \frac{\sum_0^{\infty} n \cdot \epsilon_0 \cdot e^{-n \cdot \epsilon_0/KT}}{\sum_0^{\infty} \epsilon_0 \cdot e^{-n \cdot \epsilon_0/KT}}$$

En estado de equilibrio, la distribución de las oscilaciones por valores de energía debe cumplir también con la ley de Boltzmann, pero en el cálculo de la $\langle \epsilon \rangle$, al considerar sólo los valores permitidos de las energías proporcionales a la frecuencia de la radiación (hipótesis de cuantización de Planck), la $\langle \epsilon \rangle$ resulta ahora:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{h \cdot \nu}{e^{h \cdot \nu / KT} - 1} ; \text{ con } \nu = \frac{\omega}{2\pi}$$

(en vez del resultado de Rayleigh: $\langle \epsilon \rangle = KT$)

Por lo que :

$$f(\omega, T) = \text{cte} \cdot \omega^3 \cdot \frac{h}{e^{h \cdot \omega / 2\pi KT} - 1}$$

La fórmula final obtenida acuerda con las leyes termodinámicas de Stefan y del desplazamiento de Wien ya analizadas. Por el contrario, no coincide con la fórmula de Rayleigh nada más que para las frecuencias débiles y las altas temperaturas. En este caso, puesto que el exponente $e^{-\frac{h \cdot \omega}{2\pi kT}}$ se puede hacer aproximadamente igual a $1 + \frac{h \cdot \omega}{2\pi kT}$, la $\langle \epsilon \rangle$ que resulta de la hipótesis de cuantización de la energía de Planck se aproxima a kT . En ese rango, los intercambios energéticos entre materia y radiación ponen en juego un gran número de los pequeños granos de energía; todo sucede entonces sensiblemente como si estos intercambios se hiciesen de una manera continua por lo que los razonamientos clásicos conducen a resultados bastante aproximados.

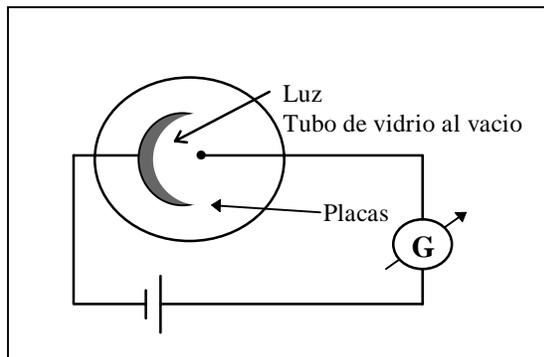
Por el contrario, para altas frecuencias y bajas temperaturas, los intercambios de energías ponen en juego un reducido número de grandes granos de energía, por lo que las discrepancias con el razonamiento clásico se hacen evidentes.

El trabajo de Planck sobre esta materia fue publicado en 1900. Fue bastante radical para la mayoría de los físicos de la época. En un intento por salvaguardar la naturaleza continua de la radiación de acuerdo con la teoría de las ondas electromagnéticas que se apoyaba sobre innumerables verificaciones, el mismo Planck sostuvo por un tiempo que la materia sería capaz de acumular de una manera continua una parte de la energía radiante que cayera sobre ella, pero no podía emitirla más que por cantidades finitas. Esto no pudo ser defendido por mucho tiempo.

En 1905, Einstein mostró que el concepto cuántico de Planck podía ser aplicado a un fenómeno proveniente de un campo diferente de la Física, pero que involucraba la absorción de radiación electromagnética por la materia: el efecto fotoeléctrico.

El efecto fotoeléctrico

Otro conjunto de resultados experimentales sin explicación en el comienzo de este siglo se relacionaba con el efecto fotoeléctrico. **Se denominó efecto fotoeléctrico a la emisión de electrones por una sustancia bajo la acción de la luz.** Este efecto se observa de la siguiente manera:



Se encierran dos electrodos metálicos en un tubo de vidrio, como se muestra en la figura.

Se vacía todo el aire de su interior y se conecta el tubo en serie con una batería y con un galvanómetro sensible, según se indica.

Claro está, no fluirá corriente en el circuito en virtud de que las dos piezas de metal en el tubo no se tocan, por lo que el circuito está abierto. La resistencia de esta porción del circuito es infinita.

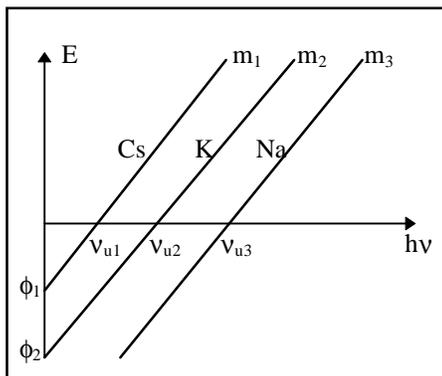
Sin embargo, si se ilumina una de las superficies metálicas, llamada placa, con una luz de longitud de onda suficientemente corta, fluye una corriente estacionaria en el circuito. Obviamente, esta corriente está sustentada por los electrones emitidos por la placa bajo la acción de la luz, los que se desplazan a lo largo del tubo hacia el colector positivo, cerrando el circuito.

Distintas observaciones experimentales de este fenómeno permiten establecer que:

- ◆ **existe una determinada longitud de onda llamada longitud de onda crítica (λ_c) que es característica para cada metal.** Únicamente longitudes de onda más cortas que la λ_c pueden causar este efecto.
- ◆ **independientemente de lo débil que sea el haz de luz, para cualquier $\lambda < \lambda_c$ los electrones son emitidos en el instante en que la luz alcanza la placa.** Sin embargo, un haz muy intenso de luz, con $\lambda > \lambda_c$, hará que los electrones abandonen la placa únicamente después que ésta haya sido calentada al rojo.
- ◆ aunque el número de electrones emitidos por la placa (intensidad de la corriente) es proporcional a la intensidad del haz luminoso, **las energías cinéticas de los electrones emitidos no dependen de la intensidad luminosa.**
- ◆ **la determinación experimental de la energía cinética máxima** de los electrones emitidos (K), para una misma placa, bajo la acción de la luz de diferentes longitudes de onda (diferentes frecuencias), **permite obtener una ley matemática que expresa:**

$$K = A \cdot \nu - B$$

siendo: A y B constantes y $\nu = c / \lambda$, con c = velocidad de la luz



Si la misma experiencia se repite para distintos materiales de la placa, es posible obtener una familia de curvas de la energía en función de la frecuencia que resultan representaciones de rectas de idéntica pendiente y diferente ordenada al origen. Nótese la existencia de una frecuencia mínima o umbral (ν_u). Esta se vincula con λ_c , siendo $\nu_u = c / \lambda_c$

De estos resultados

experimentales podemos inferir la **característica esencial del efecto fotoeléctrico**:

La energía cinética de los electrones emitidos es únicamente función de la frecuencia de la radiación incidente y no depende de modo alguno de su intensidad.

Einstein y la interpretación del efecto fotoeléctrico

La interpretación teórica del mecanismo que desemboca en la liberación de los llamados fotoelectrones no resultaba satisfactoria a partir de las concepciones clásicas.

La teoría ondulatoria de la luz, apoyada sobre bases inquebrantables hacia 1900, conduce a considerar la energía radiante como repartida uniformemente en la onda luminosa. Un electrón golpeado por una onda luminosa recibe la energía radiante de un modo continuo, por lo que la cantidad de energía que recibe el electrón por segundo es proporcional a la intensidad de la onda incidente y no depende de la longitud de onda.

Einstein tuvo en 1905 la idea notable de que las leyes del efecto fotoeléctrico indican la existencia de una estructura discontinua de la luz. Así generalizó los resultados de Planck a fin de obtener un modelo de la luz:

- ◆ Planck consideró que un oscilador podría variar su energía perdiendo o ganando cuantos de magnitud $h\nu$, donde ν es la frecuencia natural del oscilador .
- ◆ Einstein postuló entonces que **cuando un oscilador pierde un cuanto de energía $h\nu$, el oscilador emite un pulso de luz o fotón que transporta una cantidad de energía $h\nu$, siendo la frecuencia de la luz emitida la misma ν .**

A partir de considerar a **la luz como un haz de fotones donde cada fotón transporta un cuanto de energía**, Einstein interpretó las leyes del efecto fotoeléctrico.

Cuando la luz choca contra una superficie, los fotones chocan contra los electrones encerrados en el material. Si se requiere realizar un trabajo ϕ para arrancar un electrón del material, los cuantos de luz deben tener por lo menos esa cantidad de energía. La cantidad ϕ se denomina **función trabajo del material**. Esto explica el λ_c , la longitud de onda crítica (y la frecuencia umbral ν_u) para la emisión de electrones, en forma bastante natural.

Si los fotones tienen una energía tal que $h\nu > \phi$, entonces los fotones serán capaces de liberar electrones. de otra manera no fluiría corriente. Por lo tanto tenemos:

$$\nu_u = \phi / h \quad \text{o lo que es lo mismo: } \lambda_c = hc / \phi$$

De este modo, la medición de la longitud de onda crítica debería permitirnos determinar la función trabajo del material.

A cualquier longitud de onda $\lambda < \lambda_c$, (o frecuencia $\nu > \nu_u$), cada fotón tendrá suficiente energía para liberar un electrón. Esta energía adicional aparecerá como energía cinética del electrón emitido. Considerando únicamente los electrones emitidos con mayor rapidez (mayor energía cinética), tenemos que **la energía del fotón incidente es igual al trabajo que debe realizar el electrón para liberarse del material, sumado a la energía cinética del electrón una vez emitido.**

Esto es:
$$h\nu = \phi + K$$

de donde podemos obtener la expresión teórica o ecuación fotoeléctrica de la energía cinética en función de la frecuencia de la luz incidente y así poder comparar con la ley conocida a partir de las experiencias. Así:

ecuación fotoeléctrica teórica

$$K = h\nu - \phi$$

ley empírica

$$K = A\nu - B$$

La comparación de estas dos expresiones muestra que son de forma idéntica. En efecto, por medición se sabe que la constante experimental A es exactamente igual a h, como se predice en la ecuación fotoeléctrica. Por lo tanto, la teoría de Einstein del efecto fotoeléctrico es un éxito completo.

La radiación electromagnética,... ¿onda o corpúsculo?

Ni la teoría de la radiación del cuerpo negro de Planck ni la teoría fotoeléctrica de Einstein serían muy aceptables si se consideraran separadas. Cada una hace una suposición concerniente a los cuantos de energía radiante contraria a la forma en que se consideró en esa época el comportamiento de los objetos de laboratorio y la luz. El hecho de que en ambas teorías se haga uso de estos mismos conceptos, y la misma constante física para lograr explicaciones para dos fenómenos completamente diferentes, hace sospechar que estas teorías y los nuevos conceptos tienen validez. Desde esa época se han acumulado otras pruebas, y los físicos reconocen que la radiación electromagnética, cuando interactúa con la materia, se comporta como cuantos o fotones, con energía $h\nu$. Esto, claro está, no invalida nuestras ideas anteriores concerniente a la forma en

que la luz se desplaza en el espacio, en virtud de que **la naturaleza cuántica de la luz no es evidente excepto cuando choca con la materia**. Su movimiento a través del espacio evidentemente es igual al de las ondas y puede describirse de mejor manera en términos de ondas.

A partir de los cuantos de luz de Einstein es imposible describir la luz y la radiación electromagnética en la forma que describiríamos una casa o una silla. En el caso de la radiación electromagnética debemos conformarnos con describirla en términos de lo que ésta hace, en términos de su comportamiento.

Sabemos que la luz sufre difracción e interferencia y, por lo tanto, aparece como una onda bajo las circunstancias en que estos fenómenos se ponen de manifiesto. Es decir, **la radiación electromagnética puede describirse adecuadamente, por lo que se refiere a su movimiento a través del espacio en términos de onda**.

Sin embargo, **cuando la radiación interactúa con la materia de manera tal que provoque una transferencia de energía de la materia a la radiación, o viceversa, se requiere una descripción en términos de cuantos de energía o de fotones**.

Una imagen puramente corpuscular de la radiación no permite definir una frecuencia, una longitud de onda, es decir, magnitudes relevantes en una descripción ondulatoria y cuyos valores pueden ser deducidos de los fenómenos de interferencia y difracción. Y es precisamente a través del uso de esas magnitudes que Einstein define la energía del fotón: $\epsilon_{\text{fotón}} = h \cdot \nu$. La constante de Planck, por otra parte, aparece vinculando, a modo de puente, el aspecto ondulatorio de la luz (ν), bien conocido después de Fresnel, y el corpuscular ($\epsilon_{\text{fotón}}$, cuanto, corpúsculo), revelado por el descubrimiento del efecto fotoeléctrico.

De todo esto concluimos que, conceptualmente:

la radiación electromagnética se considera mejor como un medio diferente de transporte de energía, que posee propiedades peculiares. Estas propiedades son en parte las de las partículas cuánticas y en parte, los de ondas.

El Efecto Compton

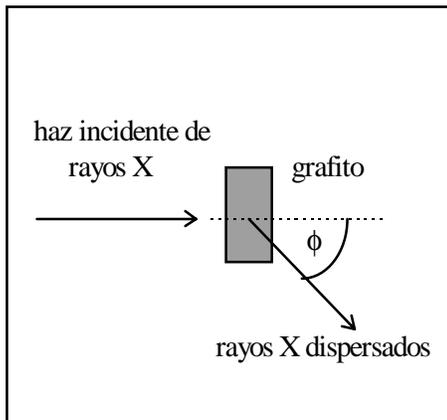
Las propiedades corpusculares de la luz se manifiestan con más claridad en un **fenómeno asociado a la dispersión de la radiación** que recibió el nombre de efecto Compton.

Se sabe que, si una radiación golpea un cuerpo material, una parte de la energía de esta radiación es dispersada en todas direcciones en forma de radiación difusa. La teoría electromagnética interpreta esta dispersión diciendo que, bajo la influencia del campo eléctrico de la onda incidente, los

electrones contenidos en el cuerpo material, entran en vibración forzada y se convierten en fuentes de pequeñas ondas esféricas secundarias que dispersan así en todas las direcciones una parte de la energía aportada por la onda primaria. Según esta interpretación, la vibración dispersada bajo la acción de una onda primaria monocromática (de frecuencia ν_p), debe tener exactamente la misma frecuencia que esta onda primaria; por ende, lo esperable en este caso sería: $\nu_d = \nu_p$.

Durante mucho tiempo, esta teoría, asentada sobre la base del comportamiento ondulatorio de la radiación, se mostró satisfactoria para la interpretación de las experiencias de dispersión realizadas.

Un estudio más preciso de la dispersión de los rayos X por diversos materiales, realizado por Compton, puso de manifiesto en 1923, un efecto no observado anteriormente.

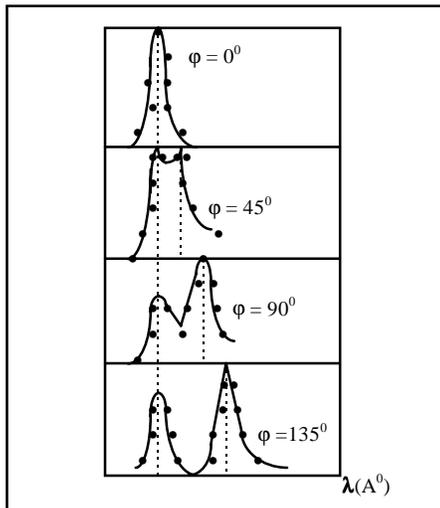


Esto es:

además de la dispersión sin cambio de frecuencia prevista por la teoría electromagnética, se produce otra dispersión de frecuencia menor, completamente imposible de prever por el razonamiento clásico.

Esquema del experimento de Compton.

Explicación de Compton



Esta figura muestra los resultados típicos de la dispersión encontrados por Compton.

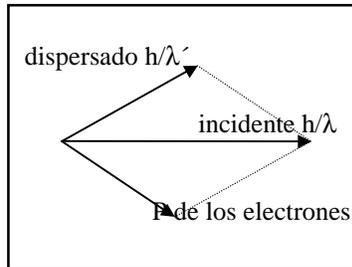
El hecho esencial observado por Compton es que:

la radiación dispersada de frecuencia menor a la de la incidente, tiene una frecuencia variable con el ángulo de dispersión, pero independiente de la naturaleza del material.

Compton y Debye interpretaron el fenómeno asimilando la dispersión con cambio de frecuencia a un choque

elástico entre un fotón incidente y un electrón contenido en la materia enlazado débilmente con los átomos.

Su teoría se desarrolla apoyándose sobre los teoremas de la conservación de la energía y de la cantidad de movimiento en la colisión.



En el momento del choque hay cambios de energía y cantidad de movimiento entre el fotón y el electrón. Como la frecuencia del fotón es proporcional a su energía, hay disminución de la frecuencia (pérdida de energía del fotón) en el momento del choque.

En la figura, esta radiación dispersada está caracterizada por una longitud de onda λ' mayor que la de la incidente.

Esta experiencia puso entonces en evidencia que: **el fotón es pues un corpúsculo, al que no sólo se le puede caracterizar con un valor de energía, sino que además, como partícula, es capaz de transferir cantidad de movimiento.**

Pero, *¿cuál es la cantidad de movimiento de esta partícula que, como radiación, se desplaza a la velocidad de la luz c ?*

Como partícula relativista:

energía	$\epsilon = m \cdot c^2$	$p = \epsilon / c$
y cantidad de movimiento	$p = m \cdot c$	

Por otra parte:

No debemos olvidar los atributos de partícula y de onda con que, a partir de Einstein caracterizamos a la radiación al interactuar con la materia.

Recordemos que:

energía del fotón $\epsilon = h \cdot \nu$

Puesto que, como vimos: $p = \epsilon / c$

Podemos calcular:

cantidad de movimiento del fotón $p = h \cdot \nu / c$

o, lo que es lo mismo:

$p_{\text{fotón}} = h / \lambda$

Veamos entonces cómo Compton planteó las ecuaciones a partir de las leyes de conservación de la energía y de la cantidad de movimiento para el sistema de las dos partículas antes y después del choque.

- **cantidad de movimiento:**

	antes	=	después	
Según el eje x :	$p_{ax} = h/\lambda$		$h/\lambda' \cos \theta + m \cdot v_x = p_{dx}$	
y en el eje y :	$p_{ay} = 0$		$h/\lambda' \sin \theta - m \cdot v_y = p_{dy}$	

siendo λ' la longitud de onda después de la dispersión y m la masa del electrón.

- **energía**

	antes	=	después	
	$E_a = h.c/\lambda$		$h.c/\lambda' + m \cdot v_x^2 + m \cdot v_y^2 = E_d$	
			$\frac{2}{2}$	

Con estas ecuaciones se puede despejar λ' en función de θ :

$$\lambda' = \lambda + h \cdot \frac{(1 - \cos \theta)}{m \cdot c}$$

Obsérvese que en esta **ecuación de Compton** se predice que $\lambda' = \lambda$ cuando $\theta = 0$. Por otra parte, a medida que θ aumenta, la longitud de onda de la radiación dispersada también aumenta, tal como se observó en la experiencia, pudiéndose reproducir los valores experimentales.

La interpretación de la otra porción de la radiación dispersada, aquella cuya longitud de onda no cambia, es la siguiente. En el estudio precedente consideramos al electrón levemente ligado, esto es cierto para los electrones más externos de los átomos. No debemos olvidar a los electrones más cercanos al núcleo, para los cuales, la energía de la radiación incidente no es suficiente, por lo que dichos electrones no pueden ser dislocados del átomo y no pueden dar energía adicional.

El fotón actúa entonces como si chocara contra un objeto masivo: el átomo como un todo. Si la ecuación de Compton se aplicara, la masa del electrón debería ser reemplazada por la masa del átomo, algo así como 20.000 veces mayor que la masa del electrón. Como resultado, λ' y λ son esencialmente idénticas para estos fotones dispersados.

Algo más a partir de Compton.....

Un análisis más profundo de estos resultados nos lleva a considerar que: ***el efecto Compton plantea conceptualmente la necesidad de una interpretación probabilística de la mecánica Cuántica.***

La experiencia realizada por Compton involucra a sistemas de electrones, no a electrones tomados aisladamente. No se puede predecir para qué lado será dispersado tal o cual electrón, pero sí se tiene una sistemática (ver las gráficas de la distribución de los electrones dispersados a distintos ángulos), cuando el número de electrones es grande. Por lo que: ***la teoría desarrollada por Compton y Debye no permite predecir cómo evoluciona un electrón, pero sí, cómo se comportan, en promedio, un número grande de electrones.***

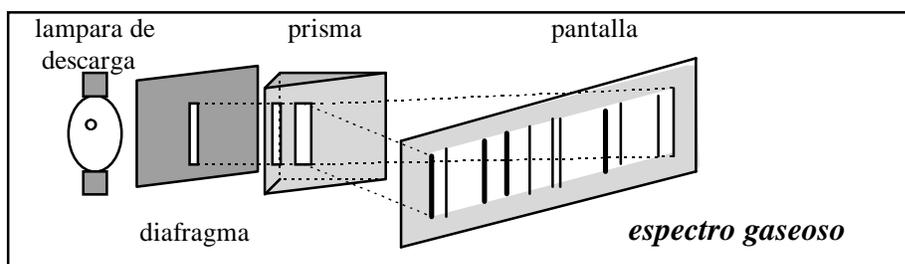
Regularidades en los espectros atómicos

Además de la radiación del cuerpo negro y del efecto fotoeléctrico, **las particularidades observadas en los espectros producidos por varios elementos químicos** era otro fenómeno que requería explicación de parte de los físicos a comienzos del siglo XX.

Un método experimental empleado frecuentemente a comienzos de siglo para analizar la composición de distintos elementos de la naturaleza consistía en examinar la luz emitida por los mismos en ciertas condiciones de excitación térmica o eléctrica. Lo que se buscaba era la obtención de espectros de emisión; para ello, se dispersaba dicha luz a través de un prisma.

El lenguaje de los espectros

Un espectro se obtiene a partir de la siguiente disposición experimental.



Podemos, por ejemplo, examinar la luz producida por el filamento caliente de un tubo incandescente. En ese caso el espectro aparecerá como una banda luminosa continua integrada por los colores del arco iris. A éste se lo denomina ***espectro continuo*** y ***es característico de la radiación emitida por un cuerpo sólido incandescente.***

También podemos obtener un espectro a partir de **una muestra de hidrógeno gaseoso u otro gas a bajas presiones**, confinado en un tubo de vidrio e inducido a emitir luz, por ejemplo, por calentamiento. Si examinamos dicha luz con un prisma, no observamos un espectro continuo, sino un **espectro de emisión de líneas**, conformado por unas pocas, separadas líneas de color. En este caso, la fuente no está emitiendo radiación de todas las longitudes de onda (colores), sino de ciertas y determinadas longitudes de onda. Más aún, si se investiga un tipo diferente de gas, por ejemplo, helio, se puede encontrar que el espectro de líneas es diferente.

♦ **Cada tipo de gas tiene su propio y único espectro de líneas.**

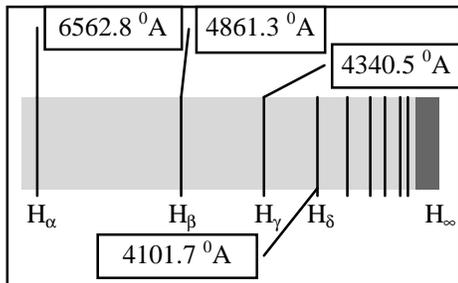
Cada patrón correspondiente a un gas determinado se constituía en su "huella digital". Esto permitió el inicio del desarrollo de una importante rama de la Física que se llama **análisis espectral**.

A través de la determinación y comparación de espectros gaseosos fue posible durante mucho tiempo a los científicos identificar sustancias en la atmósfera y estudiar la composición de las estrellas. Asimismo el desarrollo de la espectroscopía experimental condujo al descubrimiento y clasificación de un número incalculable de líneas características para los distintos gases.

En un principio, no era evidente que existieran regularidades empíricas en estos espectros y más aún, ningún avance satisfactorio se había realizado en el intento por encontrar un mecanismo físico con el cual explicar este comportamiento de los gases cuando eran sometidos a algún modo de excitación.

Las series espectrales del hidrógeno

Sin embargo, el estudio de los espectros atómicos sirvió de llave para la comprensión de la estructura de los átomos. Ante todo, **se advirtió que las líneas de los espectros atómicos no están en desorden, sino que se aúnan en grupos o series de líneas**. Esto se observó más claramente en el espectro del átomo más simple, el hidrógeno.



En 1885 J. Balmer publicó un artículo titulado "Nota relativa a las líneas espectrales del hidrógeno". Había encontrado una relación empírica entre las longitudes de onda de la serie de líneas de emisión del hidrógeno en la región visible y ultravioleta cercana a través de la siguiente fórmula:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 2^2}$$

Fórmula de Balmer

donde λ_0 es una constante; n un número entero distinto para cada línea. En particular, n debía ser igual a 3 para la primera línea (roja); n = 4 para la segunda (verde); n = 5 para la tercera (azul); y n = 6 para la cuarta (violeta).

Su éxito residió en el excelente acuerdo entre los valores calculados por su fórmula y medidas anteriores realizadas por Armstrong de las mismas cuatro longitudes de onda. Asimismo, asignó a n el valor 7 para otra hipotética línea. Predijo de este modo la longitud de onda de una línea perteneciente al espectro del hidrógeno existente en la región ultravioleta.

Balmer también admitió la posibilidad de que existiesen otras series del hidrógeno hasta entonces desconocidas, y que las longitudes de onda de las líneas en ellas se obtuviesen reemplazando el 2^2 , en el denominador de su ecuación por 1^2 , 3^2 , 4^2 , y así sucesivamente.

Si incluimos en la ecuación de Balmer todas estas consideraciones, y la expresamos en términos de la inversa de la longitud de onda, nos queda:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{fórmula generalizada de Balmer}$$

la que, para diferentes valores de m y de n fue corroborada experimentalmente, dando lugar a las llamadas series:

de Lyman : m = 1 ; n = 2, 3, 4, ...

de Pashen: m = 3 ; n = 4, 5, 6, ...

de Brackett: m = 4 ; n = 5, 6, 7, ...

de Pfund: m = 5 ; n = 6, 7, 8, ...

En esta fórmula generalizada de Balmer para las series del hidrógeno, R es la denominada **constante de Rydberg**. Su valor, redondeado hasta las milésimas, a partir de una determinación experimental es:

$$R = 109737,309 \pm 0,012 \text{ cm}^{-1}$$

Las series espectrales: un enigma pendiente

Aunque la fórmula de Balmer no sirviese directamente para la descripción de los espectros de otros gases distintos del hidrógeno, inspiró fórmulas análogas y sirvió de base para vislumbrar algún orden en otros espectros, aún más complejos. La constante de Rydberg también estaba presente en

estas nuevas fórmulas empíricas. Esto hacía cada vez más evidente **la existencia de un mismo mecanismo físico básico** detrás de la gran variedad de observaciones espectroscópicas. Había que descubrirlo para comprender el espectro de los gases en lugar de describirlos en términos de fórmulas experimentales.

Sin embargo, para la solución del enigma había que reunir otros elementos y ahondar en el conocimiento de la estructura de la materia. Hacía falta un modelo de átomo.

MODULO II

MECANICA CUANTICA:

LA ECUACION DE SCHROEDINGER

Contenidos

HACIA EL CONOCIMIENTO DE LA ESTRUCTURA ATOMICA

El átomo de Thomson

La experiencia de Lenard

El origen del átomo nuclear: Rutherford

Limitaciones del modelo de Rutherford

El modelo de Bohr del átomo de hidrógeno

Limitaciones del modelo de Bohr

Hipótesis de De Broglie: el electrón como onda

El experimento de Davisson - Germer

La ecuación de Schroedinger

A partir de la dualidad onda - corpúsculo del electrón

HACIA EL CONOCIMIENTO DE LA ESTRUCTURA ATOMICA

El átomo de Thomson

Una de las cuestiones fundamentales sin respuesta aún en 1900 se relacionaba con la estructura de los átomos. La carga y la masa del electrón se conocieron en forma aproximada, así como también las masas de los diferentes átomos, juntamente con las estimaciones de los químicos del número de electrones de cada uno.

En virtud de que las masas de los átomos son del orden de 10^3 veces mayores que la masa de los electrones en ellos, y como el átomo es eléctricamente neutro, en 1900 se creía que la mayor porción de la masa atómica llevaba una carga positiva.

El modelo más ampliamente aceptado de estructura atómica en 1900 era el **modelo de Thomson**.

En éste se consideraba el átomo prácticamente como un globo fluido positivamente cargado de un diámetro aproximado de 10^{-10} m, en el que los electrones se hallaban embebidos. Se creía que la densidad de la esfera era razonablemente uniforme. Debido a esta mezcla íntima de carga positiva y negativa dentro del átomo, todas las porciones del átomo eran casi eléctricamente neutras.

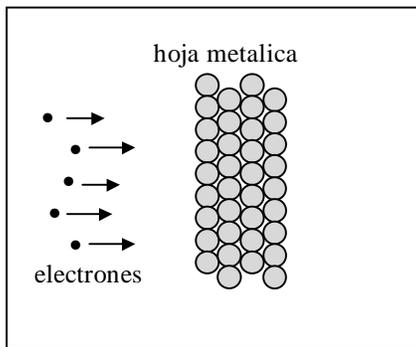
Cualquier modelo de átomo que se propusiera por entonces debía poder explicar los espectros atómicos. En base a su modelo, Thomson pudo dar cuenta de la emisión de luz por los átomos en base a suponer que, cualquier modo de excitación de los mismos debía imprimir movimiento a sus cargas constitutivas.

Según la teoría de Maxwell, los electrones oscilando respecto de su posición de equilibrio dentro del globo fluido positivo produciría la emisión de radiación electromagnética. Sin embargo, ni este modelo ni otros que se propusieron por entonces podía explicar la emisión de luz en las frecuencias discretas y específicas de las series espectrales, tal como aparecen en la fórmula de Balmer del hidrógeno.

La experiencia de Lenard

El modelo atómico de Thomson fue sometido a prueba seriamente por **Lenard** en 1903.

Disparó un haz de electrones a través de una delgada hoja de metal y midió las propiedades de los electrones que podían atravesar una hoja. Según el modelo de Thomson, la situación podría describirse como se muestra en la figura.



Las películas utilizadas por Lenard eran realmente varias capas de miles de átomos de espesor, y consecuentemente sus hojas eran en realidad más gruesas que la mostrada.

Puesto que según el modelo de Thomson, los átomos eran pequeñas esferas de densidad prácticamente uniforme, **Lenard esperaba que el haz de electrones perdiera gran cantidad**

de su energía a medida que pasara a través de la hoja.

Su experimento mostró resultados bastantes diferentes.

Podemos sintetizar **el aporte de Lenard**:

- **la mayor parte de los electrones que eran disparados contra la hoja pasaban en línea recta, sin ser desviados.** De este modo concluyó que **el modelo de Thomson del átomo era incorrecto.**
- propuso en su lugar que **el átomo consiste de agregados muy pequeños de carga positiva y negativa. La porción mayoritaria del este modelo de átomo era espacio vacío ocupado por unos cuantos electrones que flotaban en él.**

El origen del átomo nuclear: Rutherford

Los experimentos como el desarrollado por Lenard, más bien rudimentarios, inspiraron a **E. Rutherford** y colaboradores para diseñar y llevar a cabo investigaciones más precisas. Las mediciones más completas de este tipo fueron llevadas a cabo por **Geiger y Marsden en el laboratorio de Rutherford** en 1911. Sus experimentos difirieron en varios aspectos del de Lenard.

Utilizaron partículas α emitidas por varios materiales radiactivos en vez de electrones como partículas de bombardeo. Rutherford y sus colaboradores habían mostrado previamente que las partículas α son núcleos de helio de gran energía.

Estas partículas, de una masa aproximadamente 2.000 veces mayor que la de los electrones, no deberían ser desviadas notablemente por colisiones con los electrones. Era esperable que su desvío o dispersión fuera debida a la acumulación de pequeñas dispersiones causadas por los sucesivos choques con los electrones.

Como blanco utilizaron una delgada hoja de oro. El oro tiene ventajas sobre otros materiales: se forja con facilidad en hojas muy delgadas.

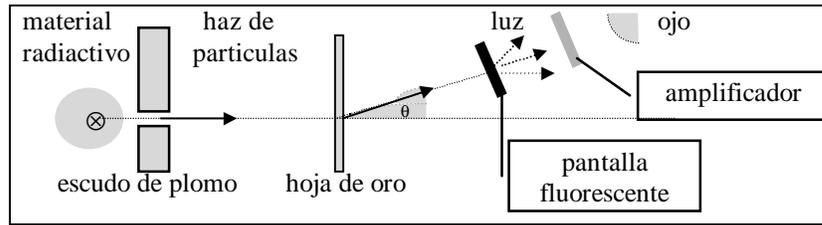
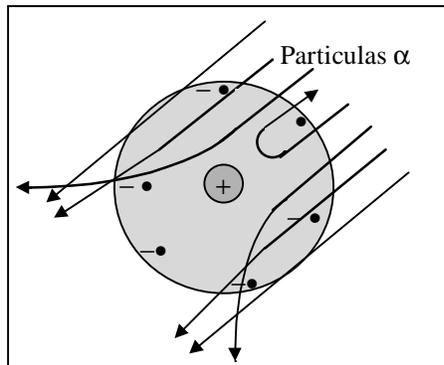


diagrama del experimento de Geiger-Marsden

El emisor de partículas radiactivas α fue blindado con plomo, y sólo se permitía emerger una porción de las partículas α como un haz angosto. Este haz incidía sobre la hoja de metal. Como detector de las partículas α , se utilizó una pequeña pantalla fluorescente. Cuando una partícula α chocaba contra la pantalla, se producía un pulso de luz. (Esto es similar a la acción fluorescente de la pantalla de TV que produce luz cuando los electrones chocan contra él). Colocando la pantalla a diferentes ángulos con relación al haz directo, se podía contar con el número de partículas α dispersadas a diferentes ángulos.

Los resultados de Geiger y Marsden confirmaron las mediciones llevadas a cabo por Lenard .



Algunas de las partículas α eran reflejadas casi en línea recta hacia atrás, indicando que habían chocado de frente con un objeto masivo.

Estos resultados indicaron claramente que: **la mayor porción de la masa del átomo está bastante concentrada en una fracción muy pequeña del volumen del átomo.**

Por otra parte, investigaciones muy detalladas mostraron claramente que la elección del metal no afectaba la mayor dispersión de las partículas α .

Este fue el **origen del concepto moderno del átomo nuclear:**

- el átomo consistente de un núcleo de dimensiones del orden $\approx 10^{-14}$ m de diámetro, que contiene casi toda la masa del átomo, excepto en lo que se refiere a la masa de sus electrones.

- el núcleo también contiene una carga positiva Ze , donde Z es el número atómico del elemento y e es la carga eléctrica, 1.60×10^{-19} C. Dispersados a través de la región exterior del núcleo dentro de una esfera $\approx 10^{-10}$ m de diámetro, se encuentran los Z electrones del átomo.
- puesto que la relación entre el radio del núcleo y el radio del átomo es aproximadamente 10^{-5} , la mayor porción del átomo es espacio vacío.

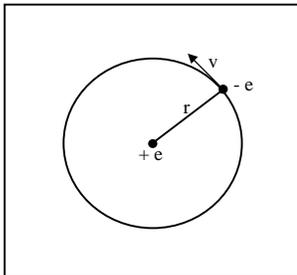
Aunque estos argumentos cualitativos indicaron que deberíamos aceptar un modelo nuclear para el átomo, el conocimiento científico requiere algo más que conclusiones basadas exclusivamente en razonamientos cualitativos. La comunidad científica prefiere deferir la aceptación de un modelo hasta que pueda mostrarse que un estudio matemático del modelo conduce a una predicción cuantitativa de los resultados experimentales.

Por esta razón, debía desarrollarse una teoría cuantitativa para dispersión de las partículas α por el átomo para poder comparar sus predicciones con los resultados experimentales ya conocidos. **La teoría cuantitativa para esta situación fue proporcionada por primera vez por E.Rutherford**, dando fuerza a su modelo.

Limitaciones del modelo de Rutherford

En síntesis, el modelo atómico de Rutherford era un **modelo planetario**:

el átomo estaba formado por un núcleo cargado positivamente rodeado por una nube de electrones orbitando a su alrededor en movimiento circular con velocidad constante.



En el “átomo planetario” la fuerza de atracción coulombiana es la que proporciona la fuerza centrípeta para ese movimiento. Por lo tanto, **los electrones están acelerados**.

De acuerdo con la teoría electromagnética clásica, el electrón orbital debía por ello radiar continuamente, lo cual explicaba la emisión de luz por los átomos. Obviamente, **esta emisión de luz no era discreta**.

Además, si la luz es emitida por el electrón en su movimiento periódico, el principio de conservación de la energía exige que la radiación emitida origine una disminución en la energía del electrón.

En el modelo de Rutherford, la energía resultaba función del radio orbital. Por lo tanto, **el electrón radiante se iría moviendo según una espiral hacia el núcleo y colapsaría. Este modelo es autodestructivo.**

El modelo de Bohr del átomo de hidrógeno

Conociendo los éxitos y fracasos del modelo de Rutherford, **Niels Bohr** se dispuso a **reconciliar la idea del átomo planetario con la evidencia experimental de su estabilidad y de las precisiones empíricas de Balmer acerca de los espectros gaseosos.** Es así como para elaborar su modelo, presentado en 1913, **tomó elementos del modelo de Rutherford e introdujo algunos conceptos cuánticos de Planck y Einstein.** Por esa época, las primeras hipótesis cuánticas ya habían dado sus frutos en la explicación de la radiación del cuerpo negro y el efecto fotoeléctrico.

El mayor éxito de Bohr fue da explicación al espectro de emisión del hidrógeno.

Veamos las **características básicas de su modelo a través de sus Postulados:**

- **el átomo es un pequeño sistema solar con un núcleo en el centro y electrones moviéndose alrededor del núcleo en órbitas bien definidas. El núcleo hace las veces de sol y los electrones, de los planetas. La interacción es coulombiana.**
Para el átomo de hidrógeno:

$$F_{\text{coul.}} = F_{\text{cent.}}$$
$$\frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2} = \frac{m \cdot v^2}{r}$$

donde m es la masa del electrón; ϵ_0 permisividad del vacío y e la carga eléctrica.

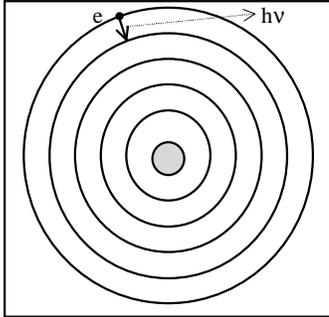
La energía cinética del electrón puede escribirse a partir de ello como:

$$\text{energía cinética del } e^- : \frac{m \cdot v^2}{2} = \frac{e^2}{8 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}$$

- **Las órbitas están cuantizadas o seleccionadas. Esto es, los electrones pueden estar sólo en ciertas órbitas. Cada órbita permitida tiene una energía asociada a ella, de modo que a la órbita más externa le corresponde energía mayor. Los**

electrones no radían energía , - no emiten luz-, mientras se encuentran en esas órbitas estables.

Llamemos a los radios de las órbitas estables de Bohr $r_1, r_2,$ etc. Un electrón que se mueve en tal órbita tiene tanto energía cinética como energía potencial eléctrica.



En una posición del electrón distante del núcleo en un valor r , podemos escribir:

energía potencial del e- :

$$-e \cdot V = \frac{-e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}$$

Por lo tanto la energía total del electrón cuando se encuentra en la órbita de radio r_4 se puede escribir como:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{cinet.}} + E_{\text{pot.}}$$

$$E_{r4} = \frac{e^2}{8 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_4} - \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_4}$$

Resolviendo, resulta:

$$E_{r4} = \frac{-e^2}{8 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_4}$$

Del mismo modo para una órbita r_5 resulta:

$$E_{r5} = \frac{-e^2}{8 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_5}$$

A medida que el electrón se acerca al núcleo, r disminuirá y la energía de los electrones también.

- **Los electrones pueden saltar desde una órbita permitida a otra. Si el electrón lo hace desde una de menor energía a otra mayor, debe ganar una cantidad de energía,- absorber un cuanto de energía radiante,- igual a la diferencia de energía asociada en cada órbita. Si pasa de una energía mayor a otra de menor valor, el electrón debe perder la correspondiente cantidad de energía radiada como cuanto de luz.**

De este modo, si consideramos una transición del electrón desde la órbita de radio r_5 a la de radio r_4 podemos escribir:

$$E_{r5} - E_{r4} = h \cdot \nu_{5-4}$$

siendo en este caso $h \cdot \nu_{5-4}$ **igual al cuanto de energía emitido como radiación** por el átomo de hidrógeno.

Si reemplazamos por las expresiones ya presentadas nos queda:

$$h \cdot \nu_{5-4} = \frac{-e^2}{8 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_5} + \frac{e^2}{8 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_4}$$

o lo que es lo mismo:

$$h \cdot \nu_{5-4} = \frac{e^2}{8 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \left(\frac{1}{r_4} - \frac{1}{r_5} \right)$$

Esta relación se puede expresar en **términos de la inversa de la longitud de onda**.

Para ello empleamos la relación ya vista: $\nu = c/\lambda$ y dividimos por el producto $h \cdot c$. De este modo:

$$\frac{1}{\lambda_{5-4}} = \frac{e^2}{8 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot h \cdot c} \cdot \left(\frac{1}{r_4} - \frac{1}{r_5} \right)$$

λ hallado a través del modelo teórico del átomo de Bohr

Tenemos así una relación para la longitud de onda de la luz emitida en una transición o salto del electrón entre las órbitas $n=5$ y $n=4$, de radios r_5 y r_4 respectivamente, hallado a través del modelo teórico del átomo de Bohr.

Es posible contrastarla con la información experimental. Si Bohr estuviera en lo cierto, la longitud de onda así calculada debería ser emitida por los átomos de hidrógeno. La información está en los espectros, en las determinaciones con base empírica de las líneas correspondientes al hidrógeno.

Recordemos la fórmula de Balmer:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{fórmula generalizada de Balmer}$$

con m y n enteros, siendo $m < n$

Existe sorprendente semejanza entre ambas. Bohr encontró que podía hacer coincidir su forma exactamente si se cumplía:

selección de las órbitas

$$m \cdot \nu_n \cdot r_n = n \cdot h$$

por cuantización del momento angular del electrón

2π

siendo:

n un número entero diferente para cada órbita;
 v_n la velocidad del electrón en la órbita;
 r_n el radio correspondiente a n.

Reemplazando r_n y utilizando la expresión de la energía cinética del electrón para eliminar v_n , se puede obtener en nuestra transición de la órbita 5 a la órbita 4:

$$1/\lambda_{5-4} = \frac{e^4 \cdot m}{\epsilon_0^2 \cdot h^3 \cdot c} \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{5^2} \right)$$

Esta expresión de la inversa de la longitud de onda correspondiente a la transición que venimos analizando, calculada a partir de la teoría de Bohr, coincide con la expresión experimental o fórmula de Balmer si hacemos $m = 4$ y $n = 5$.

El cálculo de la constante:

$$\frac{e^4 \cdot m}{\epsilon_0^2 \cdot h^3 \cdot c}$$

concuera dentro del error experimental con la constante de Rydberg ; representada por R en la fórmula de Balmer.

Limitaciones del modelo de Bohr

La teoría del átomo de hidrógeno de Bohr es satisfactoria para obtener un modelo físico que conduzca a los resultados experimentales observados en el caso de la luz emitida por los átomos de hidrógeno.

También es notable en tanto proporciona una base para el carácter cuántico de la luz. El fotón es emitido por el átomo cuando el electrón cae de una órbita a otra; es entonces un pulso de energía radiada.

Sin embargo, la teoría tiene un gran inconveniente. **Bohr no pudo proporcionar alguna razón para explicar la existencia de las órbitas estables y para la condición de selección de las mismas.**

Bohr encontró por prueba y error que la condición de cuantización del momento angular del electrón en unidades $h/2\pi$ daba el resultado correcto.

La condición es muy similar a la de un estudiante que conoce la respuesta a un problema y a continuación la obtiene por un método que no puede justificar. Nadie se siente muy feliz en esa situación.

Hipótesis de De Broglie: el electrón como onda

El primer intento fructífero para justificar la relación encontrada por Bohr para la selección de las órbitas estables fue realizado por **Louis De Broglie** en 1923. Tenía sólo 31 años y ese trabajo constituyó su tesis doctoral.

De Broglie introdujo la idea de que los electrones debían, al igual que la radiación electromagnética, poseer una propiedad de dualidad onda - partícula. En otras palabras, el sugirió, basándose en la reciprocidad general de las leyes físicas, la naturaleza ondulatoria de los electrones.

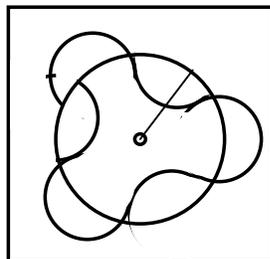
Vinculó la **longitud de onda λ de un electrón** (onda) y el **momento p de una partícula** mediante la **constante de Planck** en una relación análoga a la del fotón:

$$\lambda_{\text{De Broglie}} = h / m.v$$

Dado que h es un número muy pequeño, $\lambda_{\text{electrón}}$ de De Broglie es pequeña; por lo que las propiedades ondulatorias del electrón sólo se manifiestan en los niveles atómicos y subatómicos.

En base a esta hipótesis, De Broglie razonó que:

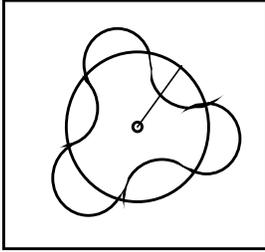
- **dado que un electrón orbitando actúa como onda, su λ tiene que estar relacionada con la circunferencia de su órbita.**
- **el electrón debía ser una onda que se interfiere a sí misma. Sólo si la interferencia de la onda es constructiva (resonancia), puede la órbita electrónica mantenerse estable.**



La órbita en este caso no es posible puesto que la onda interfiere en forma destructiva sobre sí misma.

Veamos lo que se obtiene de este razonamiento:

La circunferencia de la órbita del electrón onda debe igualar exactamente λ_{DeB} ; $2.\lambda_{DeB}$; $3.\lambda_{DeB}$; etc. Si r es el radio de la órbita circular, la longitud de la circunferencia es $2.\pi.r$.



Podemos escribir por lo tanto:

$$2.\pi.r. = \lambda ; \text{ ó } 2\lambda ; \text{ ó } 3\lambda ; \text{ etc.};$$

en general:

$$2.\pi.r. = n.\lambda ; \text{ con } n \text{ entero}$$

Esto define sólo algunos posibles valores para el radio de la circunferencia. Asimismo, este análisis conduce a los valores permitidos de momento angular del electrón. En efecto:

Puesto que $\lambda = h / m.v$,

la circunferencia tiene valores:

$$2.\pi.r. = h / m.v ; \text{ ó } 2.h / m.v ; 3.h / m.v ; \text{ etc.}$$

por lo que **a partir de la hipótesis de De Broglie el momento angular del electrón es:**

$$m.v.r = h./2\pi ; 2.h./2\pi ; 3.h./2\pi ; \text{ etc.}$$

En forma general:

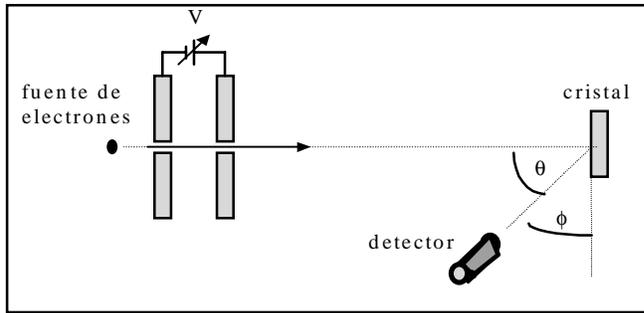
$$m.v.r = n.h./2\pi$$

El experimento de Davisson - Germer

La existencia de las ondas de De Broglie fue escasamente más atractivo que el simple enunciado de Bohr acerca de la existencia de las órbitas permitidas.

Pero **en 1927 se encontró una prueba experimental que favoreció la existencia de estas ondas y esta prueba fue de tal naturaleza que resultó concluyente.**

Davisson y Germer estaban investigando la **dispersión de un haz de electrones por medio de un cristal de metal** (níquel)



esquema del experimento de Davisson y Germer

La experiencia consistía en lo siguiente:

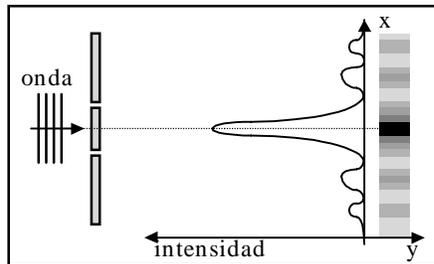
A un haz de electrones se le da una energía conocida. Se acelera a los electrones a través de un diferencia de potencial V . Davisson y Germer efectuaron mediciones del número de electrones dispersados por el cristal de níquel sobre el que hacían incidir el haz.

El resultado inesperado fue que **los electrones se dispersaban en gran cantidad a determinados ángulos especiales y a otros no.**

Esto dio origen a nuevas experiencias empleando cristales adecuadamente orientados. Buscaban ver si era posible aplicar la ley de Bragg. Los resultados fueron contundentes:

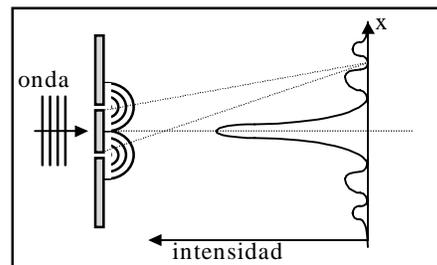
- **la dispersión del haz de electrones por un cristal podía compararse a los fenómenos de difracción e interferencia luminosa mediante una red.**
- **los electrones se reflejaban de la misma manera que debían ser reflejadas las ondas de De Broglie; por lo tanto se concluyó que los electrones tienen propiedades ondulatorias.**

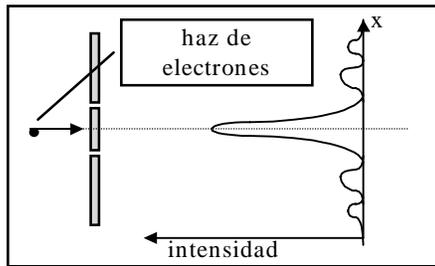
Se pueden comparar los patrones de intensidad de los electrones al ser dispersados por un cristal (experiencia de Davisson- Germer) con los generados cuando una luz pasa a través de una rendija.



Interferencia de ondas luminosas

Patrón de intensidad distancia para el fenómeno de interferencia.





Patrón de intensidad obtenido con electrones

La ecuación de Schroedinger

Desarrollando las ideas de De Broglie sobre las propiedades ondulatorias de la materia, **E. Schroedinger** obtuvo, en el año 1926 (antes de la experiencia de Davisson y Germer), su célebre ecuación.

El comparó el movimiento de una micropartícula con una función compleja de la posición y el tiempo, a la cual denominó función de onda y designó como función ψ (psi).

La función de onda caracteriza el estado de la micropartícula. La expresión para ψ se obtiene de la solución de la ecuación de Schroedinger, expresada como:

$$\frac{-\hbar^2}{8\pi^2m} \nabla^2 \psi + U \psi = i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{Ecuación de Schroedinger}$$

aquí: m es la masa de la partícula; i la unidad imaginaria; ∇^2 el operador de Laplace, el resultado de la acción del cual sobre cierta función, es la suma de las segundas derivadas parciales por las coordenadas.

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}$$

con la letra U en la ecuación de Schroedinger se designa una función de las coordenadas y el tiempo, cuyo gradiente tomado con signo inverso define la fuerza que actúa sobre la partícula. **En el caso que la función U no dependa directamente del tiempo, la misma tiene el sentido de energía potencial de la partícula.**

De la ecuación de Schroedinger se deriva que la forma de la función ψ está definida por la función U ; o sea, por el carácter de las fuerzas que actúan sobre la partícula.

La ecuación de Schroedinger es la ecuación fundamental de la mecánica cuántica no relativista. La misma no puede ser deducida de otras relaciones. Debe ser considerada como el punto de partida fundamental, cuya justeza se demuestra por el hecho de que todas las consecuencias que se derivan de la misma concuerdan con los datos experimentales.

¿Cómo estableció Schroedinger su ecuación?

Partió de una analogía óptico-mecánica que consiste en la similitud de las ecuaciones que describen el recorrido de los rayos lumínicos y las ecuaciones que describen la trayectoria de las partículas en la mecánica analítica. En óptica, el recorrido de los rayos satisface el principio de Fermat; en mecánica, la forma de la trayectoria satisface el llamado principio de la acción mínima.

♦ Ecuación de Schroedinger cuando la función U es independiente del tiempo

Si el campo de fuerzas en el cual se mueve una partícula es estacionario, la función U no depende explícitamente del tiempo y representa la energía potencial. En ese caso, la ecuación de Schroedinger se descompone en dos factores; uno de los cuales depende sólo de las coordenadas y el otro, sólo del tiempo:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}$$

si consideramos la relación entre la energía E de la partícula y la frecuencia angular ω :

$$E = h \cdot \omega / 2 \pi$$

el factor dependiente del tiempo toma la forma:

$$e^{-i \cdot \omega \cdot t} = e^{-i(2 \pi E/h)t}$$

Por lo que podemos escribir:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i(2 \pi E/h)t}$$

Si colocamos esta expresión en la ecuación de Schroedinger nos queda:

$$-h^2 \cdot e^{-i(2 \pi E/h)t} \cdot \nabla^2 \psi + U \psi \cdot e^{-i(2 \pi E/h)t} = i \cdot h \cdot (-i \cdot 2 \pi E) e^{-i(2 \pi E/h)t} \psi$$

$$\frac{1}{8\pi^2 m}$$

$$\frac{1}{2\pi h}$$

Simplificando la expresión nos queda la ecuación diferencial que define la función ψ :

ecuación de Schroedinger para estados estacionarios

$$\frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 \psi + U \psi = E \psi$$

Esta última expresión de la ecuación de Schroedinger frecuentemente toma la forma:

$$\nabla^2 \psi = -8\pi^2 m / \hbar^2 \cdot (E - U) \cdot \psi$$

Revisemos los pasos generales de acceso que se siguen cuando se utiliza la ecuación de Schroedinger en la mecánica cuántica en un campo estacionario..

- ◆ Por tratarse de un campo estacionario, la energía de la partícula se mantiene constante. Sustituimos U por la energía potencial de la partícula en función de las coordenadas x, y, z, y se resuelve la ecuación para ψ .
- ◆ La intensidad de la onda se encuentra haciendo ψ^2 . En los casos en que ψ es un número complejo, la intensidad se calcula multiplicándola por su complejo conjugado.

Interpretamos que la intensidad es proporcional al número de partículas que e encuentran en el punto en consideración. Si tenemos nada más una partícula en vez de un grupo o haz de partículas, la intensidad será proporcional al número de veces que encontramos la partícula en el punto dado si determinamos su posición en un gran número de observaciones independientes.

A partir de la dualidad onda - corpúsculo del electrón

¿cómo podemos representar al electrón con propiedades de partícula - onda?

⇒ **Las propiedades de los electrones pueden ser descritas en forma general por la función de onda ψ (psi), la cual, como vimos, es función del tiempo y del espacio. Tomemos, por ejemplo una función sencilla general, de tipo armónica.(Recordemos que cualquier otra forma de onda,**

puede ser descompuesta por Fourier en ondas armónicas de diferente frecuencia)

$$\Psi = \text{sen} (k.x - \omega.t)$$

siendo $k = 2.\pi./\lambda$ el número de onda y

$\omega = 2.\pi. v$. la frecuencia angular

- ♦ **Esta función de onda no es representación de ninguna onda o entidad física. Debe ser entendida solamente como una descripción matemática que nos permite analizar el comportamiento del electrón en forma conveniente.**

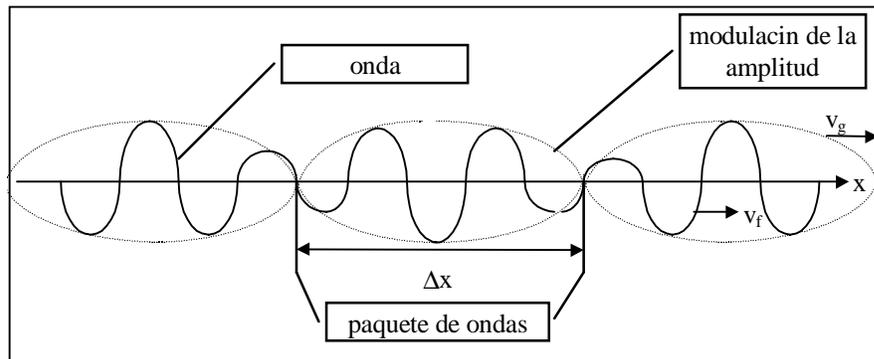
⇒ La dualidad onda -partícula puede ser comprendida mejor suponiendo que el electrón puede ser representado por una combinación de trenes de onda de diferentes frecuencias entre ω y $\omega + \Delta \omega$; y diferentes números de onda entre k y $k + \Delta k$. Podemos estudiar esto, suponiendo al principio sólo dos ondas.

$$\Psi_1 = \text{sen} (k.x - \omega.t) \quad \text{y} \quad \Psi_2 = \text{sen} [(k + \Delta k).x - (\omega + \Delta \omega) t]$$

La superposición de ambas da como resultado una nueva función Ψ :

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = 2.\cos.\left(\frac{\Delta \omega .t - \Delta k . x}{2}\right) . \text{sen} \left[\left(k + \frac{\Delta k}{2} \right).x - \left(\omega + \frac{\Delta \omega}{2} \right) t \right]$$

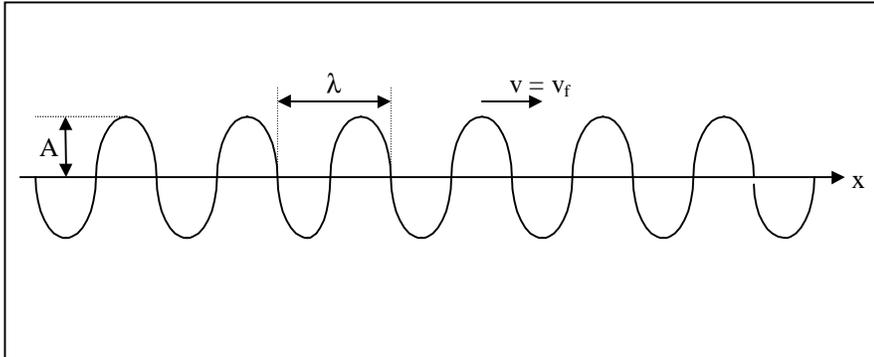
Esta expresión describe una onda senoidal, de frecuencia intermedia entre ω y $\omega + \Delta \omega$, con una amplitud levemente modulada por una función coseno.



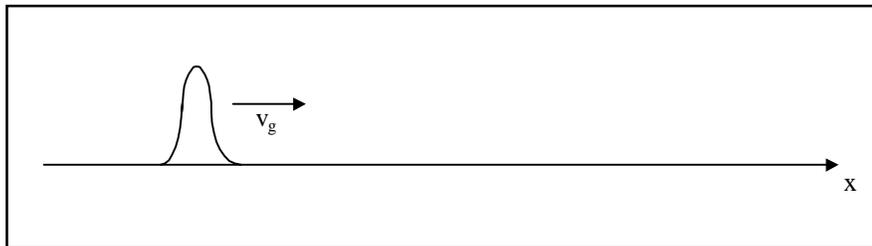
De este modo podemos distinguir lo que se llama un “**paquete de onda**”

⇒ **Analicemos más detalladamente la superposición de ondas.**

- ◆ Supongamos que ω y k fueran idénticos para las dos ondas (equivale a $\Delta\omega = \Delta k = 0$). En este caso, se obtiene un paquete de onda infinitamente largo, una onda monocromática. Esto se correspondería con la **imagen ondulatoria del electrón**. No nos indica nada acerca del lugar donde se encuentra la partícula.



- ◆ $\Delta\omega$ y Δk muy grandes. Esto nos llevaría a obtener paquetes de onda pequeños. Si además consideramos un **número grande de diferentes ondas** en vez de dos, **barriendo frecuencias entre ω y $(\omega + \Delta\omega)$** , se obtiene un **único paquete de onda**. El electrón quedaría así representado como partícula.



⇒ **Debemos distinguir diferentes velocidades**

- ◆ La velocidad de la onda material (de De Broglie) es la llamada velocidad de la onda o “**velocidad de fase**” v . Como hemos visto la onda material es una onda monocromática (o un “chorro de partículas” de igual velocidad, cuya frecuencia, longitud de onda, momento o energía pueden ser determinados con exactitud). **La ubicación de las partículas, sin embargo, está indeterminada, puesto que se extiende entre $-\infty$ y $+\infty$.**
- ◆ Mencionamos también que una **partícula** puede ser entendida como compuesta de un **grupo de ondas** o “**paquete de ondas**”. Cada onda individual tiene una frecuencia levemente diferente entre los valores ω y $(\omega + \Delta\omega)$. En forma apropiada, a la velocidad de una partícula se la llama “**velocidad de grupo**” v_g . **La envolvente propaga con la velocidad de grupo; es la velocidad de la partícula en movimiento.** La ubicación de

una partícula puede ser conocida en forma precisa, mientras, su frecuencia no.

◆ **Esto nos conduce al Principio de incertidumbre de Heisemberg**

A partir de De Broglie, la aceptación de esta descripción de las partículas atómicas nos lleva a aceptar este principio asombroso implícito en ella, que es además un hecho de la Mecánica Cuántica:

Si el momento de una partícula se conoce con precisión, entonces su posición es desconocida. Si la posición de una partícula se conoce con precisión, entonces su momento es desconocido. Se puede expresar simbólicamente:

$$(\Delta p_x) \cdot (\Delta x) \geq h / 2\pi$$

De esta relación inferimos que **la posición y el momento de una partícula única no se pueden conocer simultáneamente con exactitud.**

En base al mismo razonamiento podemos llegar a una segunda relación de incertidumbre que implica a la energía de una partícula y al tiempo en el cual obtuvo esa energía. Se expresa como:

$$(\Delta E) \cdot (\Delta t) \geq h / 2\pi$$

Si el concepto de onda de De Broglie de las partículas es cierto, entonces, las relaciones de incertidumbre son ciertas. En último análisis, éstas son consideraciones experimentales, no teóricas. **En realidad no se ha podido hasta la fecha imaginar un experimento que contradiga el principio de incertidumbre.**

El análisis experimental revela que esta incertidumbre surge básicamente debido a la naturaleza ondulatoria de los fotones y de la materia:

la incertidumbre de la medida de p , -lo mismo que de la medida de x -, en la expresión

$$(\Delta p_x) \cdot (\Delta x) \geq h / 2\pi$$

no es debida a un descuido del observador o a un deficiente equipo experimental ; se trata de algo inherente a la naturaleza de los fenómenos.

Esto mismo puede decirse en relación con el par de propiedades energía y tiempo.

Como consecuencia de ello, a partir de Heisenberg se vio la necesidad de abandonar el concepto clásico de órbita. Por otra parte se demostró que , en un experimento ilustrativo de las características ondulatorias de la luz era imposible , observar sus propiedades corpusculares; y viceversa. Además, la Física Cuántica incorpora un resultado nuevo y muy importante en lo experimental:

En el contexto de la Física Cuántica toda observación modifica lo observado.

En particular, si queremos observar un árbol o un edificio, se requiere que éstos estén iluminados, para lo cual es necesario contar con un extraordinariamente grande número de fotones; pero este hecho no provoca alteración apreciable en lo observado.

En cambio, en el orden microscópico, con el objeto de observar una partícula, ésta debe ser golpeada por un fotón de alta energía. Es necesario en este caso considerar que el momento de la partícula debe cambiar durante el proceso de observación.

Se puede verificar que aún el experimento mejor elaborado no puede violar la relación de incertidumbre de Heisenberg. Es por ello, que en nuestro recorrido hacia la búsqueda del conocimiento en el mundo microscópico de la materia, **nuestra capacidad para conocer el estado exacto de una partícula está limitado por las relaciones de incertidumbre**, insospechadas en el contexto de la Física Clásica, e incluidas en el marco de la Física Cuántica.

MODULO III
MECÁNICA CUÁNTICA
PARTE III
Modelos de potencial

Objetivos:

A través del desarrollo del presente módulo se pretenden lograr tres objetivos fundamentales :

1º- introducir modelos de potencial simples que ilustren los principales fenómenos que se presentan en la Mecánica Cuántica.

2º- mostrar cómo se calcula mediante la ecuación de Schroedinger

3º- generar capacidad de modelar y de interpretar modelos

Modelos de potencial.

Un método de análisis a partir del cálculo de la función de onda

Como hemos visto en el marco del trabajo de Schroedinger, la función de onda ψ no tiene interpretación física real, debiendo ser entendida como una descripción matemática que nos permite analizar el comportamiento de los electrones en los átomos de una manera conveniente.

Desde un punto de vista práctico, podemos considerar entonces a ψ como una magnitud intermedia cuyo conocimiento nos permitirá calcular algunas otras magnitudes, reales éstas, que sí tienen una interpretación física, aunque de orden estadístico. Por otra parte, la forma de dicha función quedará definida por la forma de la función potencial U que se considere.

Para conocer esas magnitudes y resolver así problemas que involucren comportamientos cuánticos de la materia, es necesario plantear la representación de la función potencial más aproximada a la situación concreta en estudio. Es decir, se requiere trabajar con modelos de potencial representados matemáticamente por la función U de la ecuación de Schroedinger, que contendrá la información característica en cada caso.

Es así como a través de una selección adecuada de la función potencial podremos modelar el átomo, una barra de metal, la unión de dos metales, un sólido cristalino, el efecto de un campo eléctrico sobre un material, etc. Asimismo, y de acuerdo con la situación a modelar, los potenciales a considerar serán diferentes. Según su tipo, éstos pueden ser expresados en coordenadas cartesianas ortogonales, en coordenadas radiales, etc.

A modo de ejemplo, si queremos modelar un átomo, podemos suponer en principio al electrón encerrado en una caja de potencial cuadrada; un modelo mejor resultaría de considerar un potencial central del tipo $-e^2/r$, aunque este tipo de potencial hace más dificultosa la resolución de la ecuación de Schroedinger.

A lo largo de este módulo nos proponemos analizar sólo potenciales simples; éstos, no obstante, con menor o mayor aproximación, modelarán situaciones que se nos presentan habitualmente en el estudio de los materiales. De todos los casos propuestos, resolveremos con detalle aquéllos que consideramos más formativos para los objetivos de este curso; de los restantes, desarrollaremos el modelo y expondremos las soluciones y los principales resultados que de ellas se desprenden.

Concretamente estudiaremos distintos potenciales de tipo cartesiano, crecientes en complejidad,

desde:

- la casilla de potencial unidimensional

hasta :

- el potencial periódico de un cristal

para finalizar estudiando:

- el potencial central de tipo electrostático, o lo que es lo mismo, la representación del átomo de hidrógeno.

Resolución de la ecuación de Schrodinger para un electrón en una casilla de potencial unidimensional

La resolución de la ecuación de Schrodinger en problemas atómicos y moleculares es muy dificultosa, y se escapa de los alcances de este curso.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 y} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 z} - \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \Psi = 0$$

♠ Sin embargo, para comprender el carácter de los resultados del estudio mecánico cuántico del átomo, que se realizará mas adelante , vale la pena examinar la resolución de la ecuación de Schrodinger en un caso simple.

♠ Resolvamos primero un modelo imaginario llamado **casilla de potencial**.

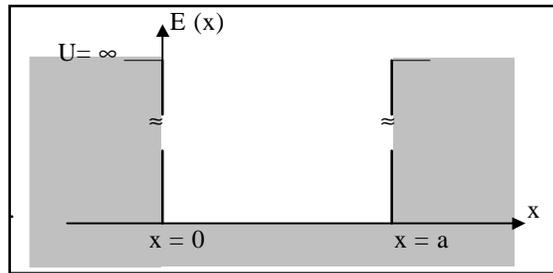
En este modelo imaginaremos el átomo como si fuera un cubo, en el cual se encuentran encerrados los electrones. Este sería un caso en el que la función potencial ha de ser expresada en términos de tres dimensiones, las que se corresponderían con tres aristas perpendiculares entre sí del cubo considerado.

Puesto que en la representación aproximada del átomo aislado no consideramos una dirección privilegiada para la función potencial, podemos encarar su resolución a partir de considerar un modelo unidimensional.

♠ Así, resolveremos primeramente la ecuación para un **potencial unidimensional**.

En este modelo, el electrón puede moverse solamente en una dirección, por ejemplo, en el eje x, en el intervalo definido por las cotas ($x=0$; $x = a$). (ver figura)

casilla de potencial unidimensional



En los límites del intervalo, la energía potencial U del electrón es constante y por comodidad, la tomaremos igual a cero. Fuera de los límites del intervalo, la energía potencial se vuelve infinitamente grande, esto significa que el electrón no puede salir del intervalo $0 < x < a$.

Si partimos de la expresión original de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo, para este caso concreto la ecuación toma la forma:

$$\frac{-\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi$$

Para la resolución de esta ecuación es necesario hallar la función Ψ y un valor tal de la energía E del electrón que satisfaga la ecuación.

Por otra parte, puesto que el electrón sólo puede estar dentro del intervalo, se puede escribir:

$$\int_{-\infty}^0 |\Psi|^2 = \int_a^{\infty} |\Psi|^2 = 0 \quad \text{y} \quad \int_0^a |\Psi|^2 = 1$$

expresión que da la probabilidad igual a 1 de estancia del electrón en el interior de la casilla. Esto fija las condiciones de contorno para la función de onda ψ :

$$\Psi(x < 0) = \Psi(0) = \Psi(a) = \Psi(x > a) = 0$$

Las funciones que satisfacen las condiciones señaladas son:

$$\psi_n = A \text{ sen } \frac{n \pi x}{a}$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$ y $A = \text{cte.}$

El valor $n = 0$ está excluido pues implicaría $|\Psi|^2 = 0$ en la casilla, o sea, la ausencia del electrón.

Sustituyendo Ψ por su valor en la ecuación de Schrodinger se pueden hallar los valores de la energía E:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \quad \text{donde } n = 1, 2, 3, \dots$$

Habiendo obtenido los valores de Ψ_n y de E_n hemos resuelto la ecuación de Schroedinger para la casilla de potencial unidimensional. Sólo falta hallar la constante A. Para ello recordemos que:

$$\int_0^a |\Psi|^2 dx = 1$$

de donde, reemplazando se obtiene $A = \sqrt{2/a}$

Resulta importante reflexionar acerca de estos resultados.

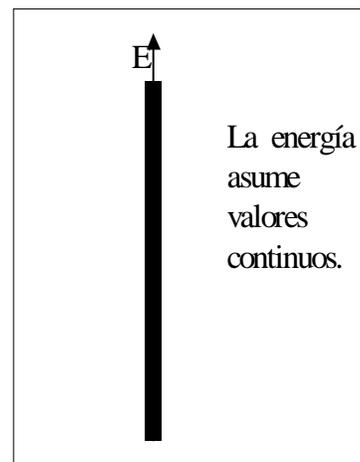
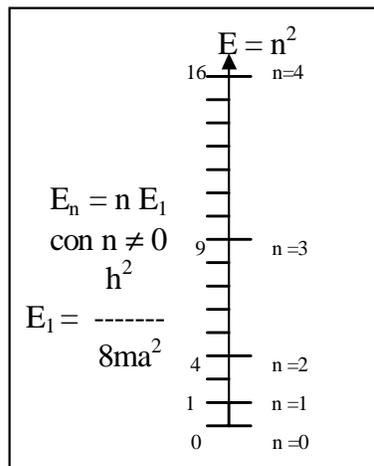
♣ Ante todo debemos señalar la gran diferencia entre las imágenes cuántica y clásica del problema.

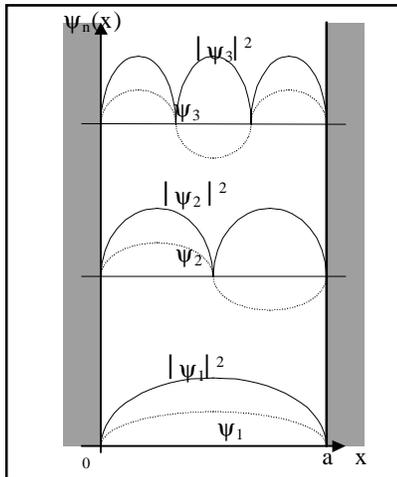
Imagen cuántica

♦ La energía asume determinados valores discretos

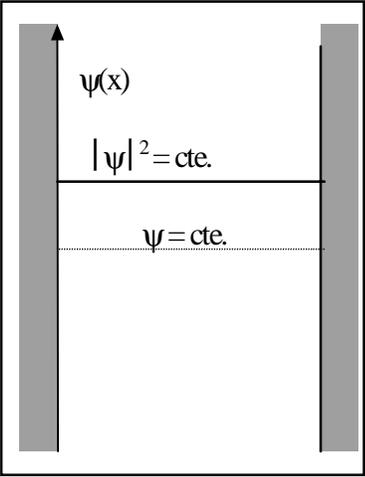
Imagen clásica

♦ La energía asume cualquier valor





♦ La probabilidad de encontrar a la partícula varía en el intervalo



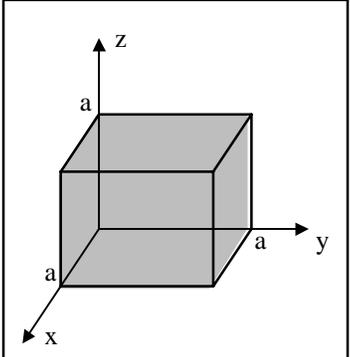
♦ La probabilidad de encontrar a la partícula es igual en todo el intervalo

Representaciones de la función de onda y de la probabilidad según las imágenes cuántica (izquierda) y clásica (derecha)

Casilla de potencial tridimensional

De la solución de la ecuación de Schroedinger obtenida para la casilla de potencial unidimensional se hace comprensible la existencia de un conjunto discreto de niveles energéticos del electrón en el átomo.

Con el fin de aclarar otras particularidades de la estructura electrónica es conveniente estudiar el movimiento de los electrones en una casilla de potencial tridimensional.



En este problema el electrón está confinado en un cubo de arista a , el origen de coordenadas se fija en uno de los ángulos del cubo.

La energía potencial de la partícula en el interior de la casilla es constante. (por simplicidad igual a cero). Fuera de ella posee una magnitud infinitamente grande.

Por esto último, el electrón no puede salir de la casilla bajo ninguna circunstancia.

Como en el problema anterior, tenemos en este caso una situación imaginaria; sin embargo existe un fenómeno real que en cierta medida responde a las condiciones impuestas: esto es el movimiento de los electrones en un pedazo de metal. Estos se mueven en todas direcciones pero no salen fuera de los límites del pedazo. Por eso, este modelo se utiliza en la teoría del estado metálico.

En el caso dado, es necesario hallar la solución de la ecuación de Schroedinger en tres dimensiones.

El método que se emplea frecuentemente durante la resolución de problemas semejantes es el siguiente:

- Se analiza la ecuación, y se prueba dividirla en partes, cada una de las cuales encierra sólo una de las tres coordenadas. Si esto se logra entonces el problema se simplifica en gran manera.

En nuestro caso vemos si esto es posible. Así consideramos:

$$U(x,y,z) = U(x) + U(y) + U(z)$$

$$E(x,y,z) = E(x) + E(y) + E(z)$$

Supongamos que podemos en nuestro caso representar :

$$\Psi(x,y,z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$$

Sustituyendo en la ecuación de Schroedinger ésta puede expresarse como suma de tres ecuaciones idénticas para cada una de las variables del tipo :

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} - \frac{8\pi^2 m}{h^2} \{ E(x) - U(x) \} X = 0$$

De esta forma, la división efectuada nos redujo el problema tridimensional a tres de una dimensión que nos es conocido. Por lo tanto :

$$X(x) = A_x \text{ sen } \frac{n_x \pi x}{a} ; Y(y) = A_y \text{ sen } \frac{n_y \pi y}{a} ; Z(z) = A_z \text{ sen } \frac{n_z \pi z}{a}$$

con : $n_x = 1,2,..$; $n_y = 1,2,..$, $n_z = 1,2,..$

$$\text{y además } E = E(x) + E(y) + E(z) = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \cdot \frac{h^2}{8ma^2}$$

⇒ **A partir de lo obtenido podemos puntualizar:**

♣ **El paso de un problema unidimensional a uno tridimensional provoca la aparición de tres números (n_x , n_y , n_z) de valores enteros en la expresión de la función de ondas.**

♣ Así en la casilla de potencial unidimensional, el electrón sólo tiene un grado de libertad, en el potencial tridimensional, tres, pues el movimiento es posible en las direcciones de cada una de las tres coordenadas x , y , z . Si además es capaz de girar sobre su eje entonces aparece el cuarto grado de libertad, etc.

♣ **Si a una misma energía responden varios estados distintos**, los que son caracterizados por distintas funciones de ondas, entonces **se dice que el nivel energético dado es degenerado**.

$n_x=1$	$n_y=2$	$n_z=1$
$n_x=2$	$n_y=1$	$n_z=1$
$n_x=1$	$n_y=1$	$n_z=2$

Dependiendo del número de estados, la degeneración puede ser doble, triple, etc.

♣ El análisis mecánico - cuántico de los distintos casos del movimiento de los electrones en una zona limitada del espacio (p.ej. un átomo, una molécula) muestra que **la función de ondas de la partícula siempre contiene parámetros sin dimensiones, los cuales pueden tomar una serie de valores enteros**.

♣ Estos parámetros se llaman **números cuánticos**.

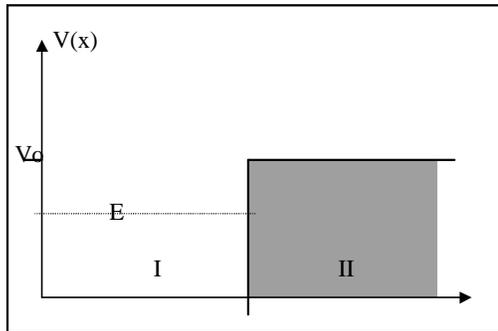
♣ **La cantidad de números cuánticos** contenidos en la solución **es igual al número de grados de libertad** de la partícula.

♣ Se llama número de **grados de libertad** al número de **componentes independientes del movimiento** de la partícula.

Escalón de potencial

Supondremos al electrón propagándose en el sentido positivo de la coordenada x , encontrándose con una barrera de potencial V_0 (alto de la barrera), que es mayor que la energía total E del electrón, pero de un valor finito.

La figura siguiente representa esta situación.



Para resolver este caso tenemos que escribir las dos ecuaciones (para las regiones I y II), que resultan de la expresión de la ecuación de Schroedinger..

En la región (I) , $V = 0$ por lo tanto la ecuación de Schroedinger se reduce a la ecuación del electrón libre :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

y en la región (II) :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0$$

Las soluciones a estas ecuaciones son:

$$(I) \quad \psi_I = A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x}$$

$$\text{donde : } \alpha = \sqrt{2mE / \hbar^2}$$

$$\text{y } (II) \quad \psi_{II} = C e^{\beta x} + D e^{-\beta x}$$

$$\text{donde : } \beta = \sqrt{2m / \hbar^2 (E - V_0)}$$

Definiendo nuevos parámetros : $\gamma = i\beta = \sqrt{2m / \hbar^2 (V_0 - E)}$,

con lo que resulta $\beta = \gamma / i$, podemos hacer :

$$\psi_{II} = C e^{\gamma x} + D e^{-\gamma x}$$

Aplicando condiciones de contorno encontramos :

- si $x \rightarrow \infty$ entonces $\psi_{II} \rightarrow 0$ lo que implica que debe ser $C = 0$
- si $x = 0$ entonces $\psi_I(x=0) \equiv \psi_{II}(x=0)$ por lo que $A + B = D$

También debe ser $(\partial\psi_I/\partial x)_{x=0} \equiv (\partial\psi_{II}/\partial x)_{x=0}$

reemplazando: $A i\alpha + B i\alpha = -\gamma D$

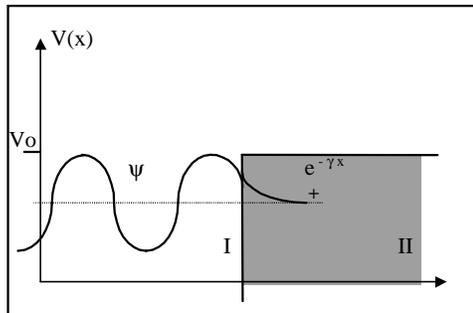
de donde obtenemos :

$$A = D/2 (1 + i \gamma/\alpha)$$

$$y \quad B = D/2 (1 - i \gamma/\alpha)$$

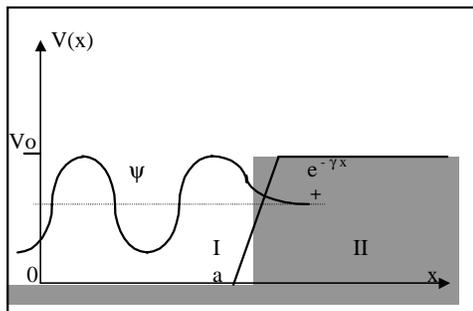
con D amplitud de la onda electrónica en la región II .

En la figura se observa la penetración de la barrera de potencial por los electrones.



- ◆ Este modelo es ilustrativo de lo que ocurre en el borde de un material.

En efecto , cuando los electrones van del seno del material hacia su superficie, al llegar a ella, mantienen su estado de movimiento. En ese instante el material gana una carga equivalente positiva, y los electrones se ven atraídos por la acción de esta fuerza atractiva. Al cabo de un cierto recorrido invierten su sentido de movimiento y retornan al seno del material.

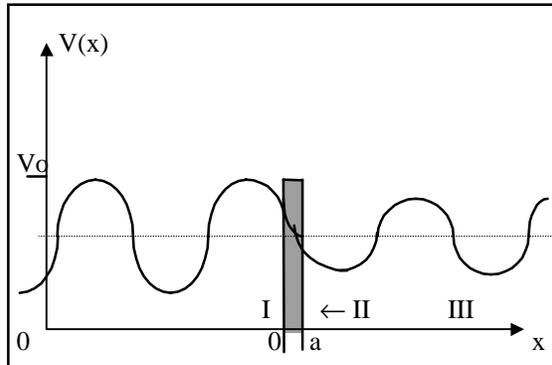


Obsérvese que, en promedio, los electrones se encuentran *más afuera* del material que los iones de la red, generándose así un campo eléctrico en la superficie del material, por lo que un modelo de potencial más realista de los bordes del material sería el de la figura.

Por otro lado obsérvese que al intentar poner en contacto dos materiales estas *colas* de electrones en las superficies generan repulsión electrostática evitando la adhesión.

Efecto túnel.

Consideremos ahora que la barra de potencial posee un espesor a , muy delgado, menor que la penetración de los electrones en la barrera.



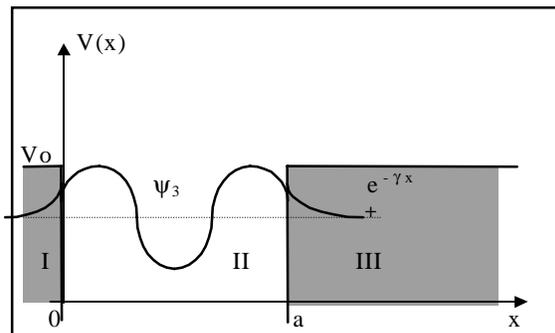
Si del otro lado de ella (región III) existen estados cuánticos libres, los electrones podrán atravesarla

Este fenómeno se denomina **efecto túnel**.

Electrones en un pozo de potencial finito.

Consideremos ahora no ya una barrera de potencial, sino una región con dos barreras finitas a cada lado de ella.

En la figura se grafica ψ_3 es decir ψ para $n=3$

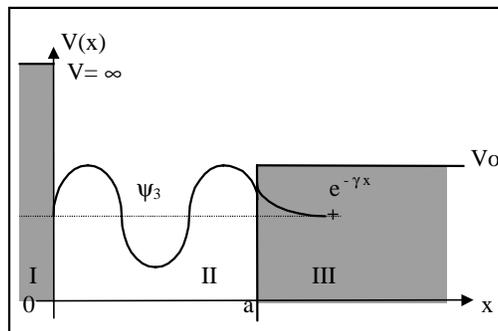


En función de la distancia $0 - a$ podremos representar modelos distintos, si esta distancia es del orden de las dimensiones del átomo, este modelo representará una aproximación al modelo de éste, si la distancia $0 - a$ es muchos órdenes de magnitud mayor que la del átomo, tendremos el modelo de un material con sus dos bordes.

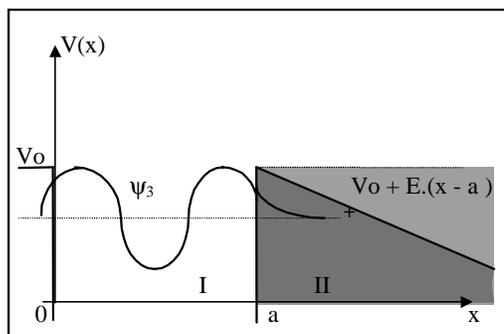
Si estudiáramos cualquiera de estos modelos en tres dimensiones, los resultados serían equivalentes a estudiar tres veces el problema en una dimensión.

Electrones en un pozo de potencial asimétrico

Este potencial se aproxima al que ve un átomo al acercarse a otro para constituir una molécula.



Escalón de potencial con un campo eléctrico aplicado a uno de sus lados.

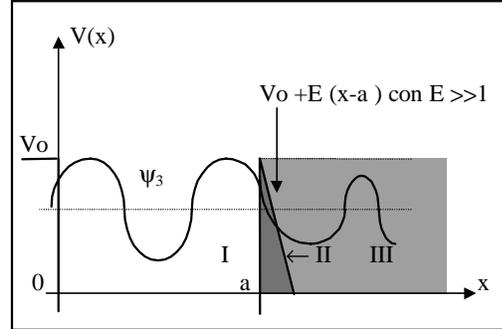


Con este potencial se puede modelizar el borde de un material al que se le aplica un campo eléctrico en uno de sus extremos. (Por ejemplo lo que sucede entre placas de un capacitor con dieléctrico de aire)

Escalón de potencial con un campo eléctrico intenso aplicado a uno de sus lados. Emisión por campo intenso..

Este potencial se emplea para explicar la emisión de electrones desde la superficie de un electrodo en presencia de un campo eléctrico muy intenso.

Obsérvese que un electrón puede llegar a cruzar a través de la barrera de potencial por efecto túnel



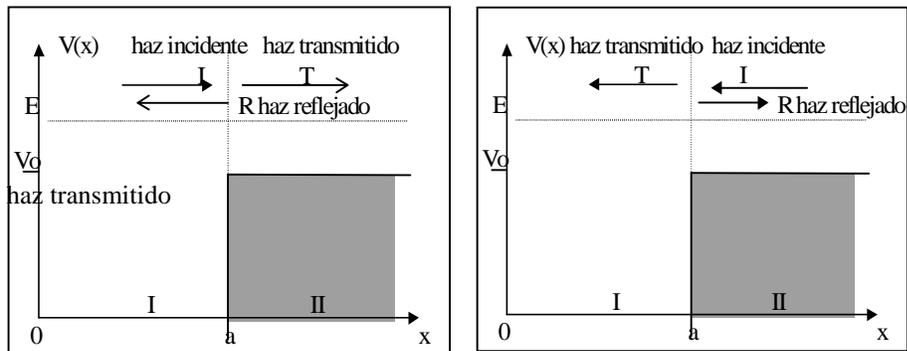
Transmisión y reflexión de electrones a través de un escalón de potencial

Supongamos un haz de partículas con energía cinética E que se mueve en dirección de un escalón de potencial V_0 .

Analicemos el caso :

$$E > V_0$$

Clásicamente el haz, al encontrar el escalón lo debería cruzar en uno u otro sentido variando solo su energía cinética, pero **cuánticamente** ocurre algo radicalmente distinto: parte del haz lo atraviesa, y parte de éste se refleja.



La condición de contorno viene dada en ambos casos por :

$$I = T + R \text{ (en } x = a \text{)}$$

Obsérvese que clásicamente no debería haber onda reflejada.

Esto es equivalente a lo que se presenta para una onda electromagnética, en una línea de transmisión frente a un cambio de la impedancia de ésta. (en este caso el cambio de potencial es equivalente al cambio de impedancia).

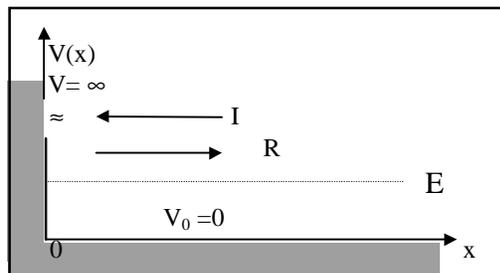
Para ondas electromagnéticas en el rango de la luz visible esto equivaldría al cambio de índice de refracción del medio.

♦ En este caso el haz de partículas se comporta como una onda (Recordar la dualidad partícula onda).

Reflexión de electrones frente a una barrera de potencial .

Si la barrera es infinita.

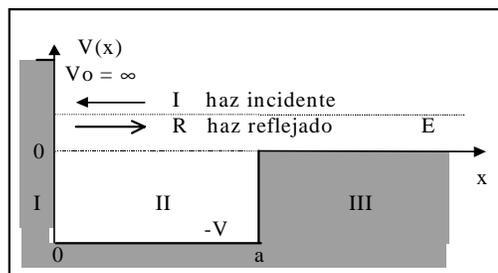
En este caso $I = R$



Obsérvese que en esta reflexión no se producirá un cambio de fase.

Si en cambio encontramos un pozo de potencial finito en el camino, se producirá un cambio de fase.

Este surge de considerar en el cálculo de Schroedinger el potencial $-V$ en la región II.

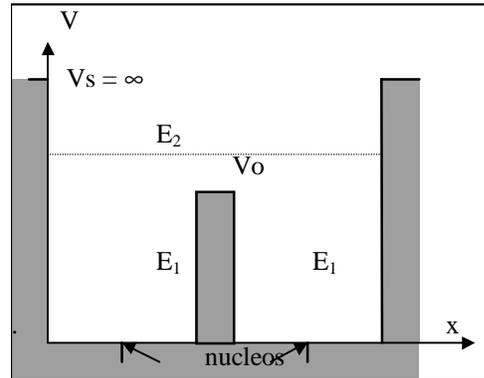


El electrón en el potencial de una molécula diatómica.

Consideremos los casos :

1- $E_1 < V_0$

Si el ancho de la barrera de altura V_0 es tal que no se produce efecto túnel , entonces los electrones de energía E_1 funcionarán cada uno como electrones ligados al respectivo núcleo. (ver figura)

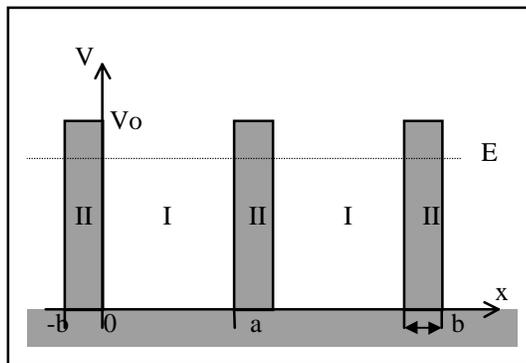


2- $E_2 > V_0$

En este caso el electrón prácticamente no verá la barrera de altura V_0 y se moverá a lo largo de toda la molécula. (ver figura)

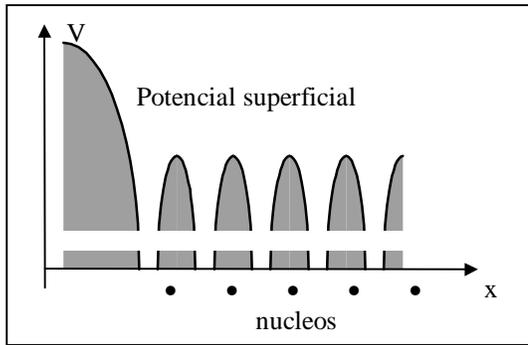
El electrón en el potencial periódico de un cristal

Estudiaremos el caso para $E < V_0$.



Es evidente que este caso es una simplificación del potencial real que existe en un cristal.

Como simplificación, ésta no tiene en cuenta, fundamentalmente el potencial real de los átomos (que depende de $1/r$) ni el solapamiento de los potenciales de los átomos individuales.



Un modelo mejor es el de Muffin que se puede observar en la figura, aunque sigue siendo unidimensional.

Retornando nuestro modelo simplificado vemos que podemos escribir la ecuación de Schroedinger para las regiones I y II de la siguiente forma :

$$(I) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

$$(II) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0$$

para abreviar escribiremos, como en problemas anteriores:

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\text{y} \quad \gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

La resolución simultánea de estas ecuaciones es dificultosa. Bloch mostró que la solución para este tipo de ecuaciones tiene la forma:

$$\psi(x) = u(x) \cdot e^{ikx}$$

En la ecuación de Bloch, $u(x)$ es una función periódica, la cual posee la periodicidad de la red en el sentido de las x . No posee una amplitud constante en el sentido x , cambiando periódicamente (Amplitud modulada). Obviamente es distinta para cualquier otra dirección de la red.

calculando
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial x} 2ik - k^2 u \right) e^{ikx}$$

y reemplazando en las ecuaciones para las zonas I y II obtenemos:

$$(I) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2ik \frac{\partial u}{\partial x} - (k^2 - \alpha^2) u = 0$$

$$(II) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2ik \frac{\partial u}{\partial x} - (k^2 + \gamma^2) u = 0$$

estas ecuaciones son conocidas y sus soluciones son :

$$(I) \quad u_I = e^{-ikx} (A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x})$$

$$(II) \quad u_{II} = e^{-ikx} (C e^{-\gamma x} + D e^{\gamma x})$$

A , B , C , D pueden determinarse a partir de las siguientes condiciones de continuidad y periodicidad (en a+b) :

$$u_I(x=0) = u_{II}(x=0) \qquad u_I(x=a) = u_{II}(x=-b)$$

$$\left. \frac{\partial u_I}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial u_{II}}{\partial x} \right|_{x=0} \qquad \left. \frac{\partial u_I}{\partial x} \right|_{x=a} = \left. \frac{\partial u_{II}}{\partial x} \right|_{x=-b}$$

Reemplazando nos queda :

$$A + B = C + D$$

$$A (i\alpha - ik) + B (-i\alpha - ik) = C (-\gamma - ik) + D (\gamma - ik)$$

$$A e^{(i\alpha - ik)a} + B e^{(-i\alpha - ik)a} = C e^{(ik + \gamma)b} + D e^{(ik - \gamma)b}$$

$$\begin{aligned} A i(\alpha - k)e^{ia(\alpha - k)} - B i(\alpha + k)e^{-ia(\alpha + k)} &= \\ &= -C (\beta + ik)e^{(ik + \gamma)b} + D (\beta - ik)e^{(ik - \gamma)b} \end{aligned}$$

Por lo tanto hemos resuelto el problema. **En este caso, sin embargo, el conocimiento de ψ no es lo que reviste mayor importancia. En cambio, es de sumo interés determinar una condición para la existencia de las soluciones de la ecuación de Schroedinger en las regiones I y II.**

Esta condición limitará los posibles niveles de energía E_n .

Para hallarlos bastará emplear el último sistema de cuatro ecuaciones. Recordemos que para que en este sistema existan soluciones basta con estudiar su determinante.

Planteando el determinante e igualándolo a cero, y empleando las ecuaciones de Euler se llega a:

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \sinh(\gamma b) \sin(\alpha a) + \cosh(\gamma b) \cos(\alpha a) = \cos k(a + b)$$

Para simplificar la discusión supondremos que:

b es pequeño;

Vo es grande

y el producto Vo. b., denominado poder de la barrera de potencial, permanece finito. Como es posible observar en la representación del modelo simplificado, Vo.b. es el área de la barrera de potencial.

Si Vo es muy grande, entonces E se puede considerar que es pequeño respecto de Vo y por lo tanto obtenemos :

$$\gamma = \sqrt{2m / \hbar^2} \cdot \sqrt{Vo}$$

multiplicando por b obtenemos :

$$\gamma b = \sqrt{2m / \hbar^2} \cdot \sqrt{(Vo b) b}$$

como , Vo.b debe ser finito y $b \rightarrow 0$, entonces γb debe ser muy pequeño; por lo tanto :

$$\cosh(\gamma b) \approx 1 \quad \text{y} \quad \sinh(\gamma b) \approx \gamma b$$

Por otra parte, podemos despreciar α^2 comparado con γ^2 y b comparado con a.

Reemplazando en nuestra ecuación nos queda :

$$\frac{m}{\alpha \hbar^2} Vo b \sin \alpha a + \cos \alpha a = \cos ka$$

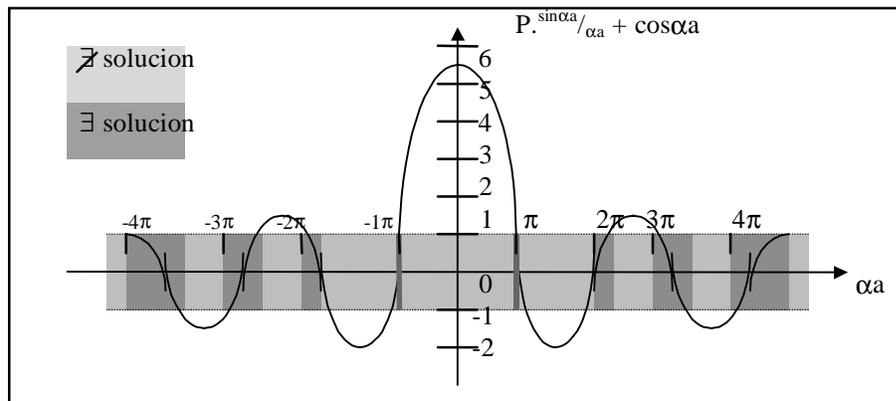
Si llamamos:

$$P = m Vo b / \hbar^2$$

Finalmente obtenemos :

$$P \cdot \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka$$

Esta es la relación deseada que provee las soluciones permitidas de la ecuación de Schroedinger, puesto que sólo algunos valores de αa son posibles debiéndose cumplir $\cos(ka) \leq 1$. Esta condición se aprecia en la figura:



Si recordamos que E se relaciona con α , siendo: $\alpha^2 = 2m/\hbar^2 E$, podemos concluir que **sólo algunos valores de E están definidos**.

El análisis de estos resultados nos permite arribar a la siguiente conclusión:

como αa es función de la energía, la limitación de estos valores de αa significa que **un electrón que se mueve en un potencial variable periódico, puede ocupar sólo ciertas zonas de energía permitida**.

Fuera de estas zonas o "**bandas**", se encuentran entonces zonas de energía prohibida.

♣ De la figura se obtiene que para valores crecientes de αa las zonas o **bandas** de energía prohibida se vuelven mas pequeñas.

Como el tamaño de la bandas de energía permitidas y prohibidas varían según varíe P. Se presentan 4 casos de interés.

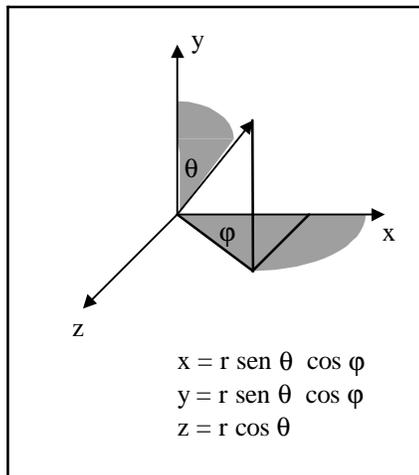
Considerando los valores de V_0b (fuerza del potencial barrera) y su proporcionalidad con p, tenemos:

- ♦ V_0b grande \Rightarrow p grande \Rightarrow las bandas permitidas se estrechan.
- ♦ V_0b pequeño \Rightarrow p chico \Rightarrow las bandas permitidas se agrandan
- ♦ $V_0b \rightarrow 0 \Rightarrow P \rightarrow 0 \Rightarrow \cos \alpha a = \cos ka \Rightarrow \alpha = k$, por lo tanto obtenemos:
 $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ energía de los electrones libres.
- ♦ $V_0b \rightarrow \infty \Rightarrow P \rightarrow \infty \Rightarrow (\sin \alpha a) / \alpha a \rightarrow 0$ lo cual es solo posible si $\alpha a = n\pi$
 $\alpha^2 = n^2 \pi^2 / a^2$ lo que lleva a : $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$ pozo de potencial con barrera infinita.

El electrón en un potencial central de tipo electrostático.

El átomo de hidrógeno. Explicación mecánico-cuántica.

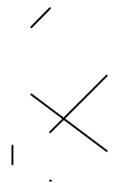
Es el más simple de los átomos, pues tiene solamente un electrón que se mueve en el campo del núcleo.



En este caso la función de la energía potencial U en la ecuación de Schroedinger , toma la forma :

$$U(r) = - \frac{e^2}{r}$$

Por lo tanto debemos escribir la ecuación de Schroedinger en coordenadas polares, lo que hace que su solución sea un problema matemático más complicado.



Señalaremos en este caso solamente las principales características de esta solución y examinemos su sentido físico.

En este tipo de problemas, para describir el movimiento del electrón, es cómodo hacer coincidir el origen del sistema de coordenadas polares con el núcleo del átomo.

Si en el sistema rectangular (cartesiano) de coordenadas, la posición de la partícula esta dada por las coordenadas x, y, z , en el sistema polar ella se determina por la magnitud del radio vector r (distancia del centro) y por los ángulos θ (ángulo de latitud) y φ (ángulo de longitud).

En la figura anterior se ve en qué forma las coordenadas polares están relacionadas con las rectangulares.

Habíamos visto que en una casilla (cuadrada) de potencial tridimensional, la función de onda Ψ podía expresarse como producto de funciones de cada una de las variables.

Por lo tanto la función Ψ debe representarse en forma de producto de tres funciones cada una de las cuales contiene solamente una variable:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

La expresión $R(r)$ se denomina **parte radial** de la función de onda, y el producto $\Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$ **parte angular**.

La presencia de **tres grados de libertad conduce a que en la solución aparezcan** tres magnitudes que pueden tomar sólo números enteros, **tres números cuánticos**; ellos se representan por las letras n, l, m .

Estas magnitudes entran en las expresiones de las componentes tanto radial como angular de la función de ondas.

En el caso más general el resultado de la solución de la ecuación de Schroedinger para el átomo de hidrógeno se puede expresar como tres funciones de las coordenadas radial y angulares de la siguiente forma:

$$R(r) = F_1(n, l)$$

$$\Theta(\theta) = F_2(l, m)$$

$$\Phi(\varphi) = F_3(m)$$

donde los números cuánticos n, l, m pueden tomar los siguientes valores :

$$\begin{aligned}n &= 1, 2, 3, 4, \dots, \infty \\l &= 0, 1, 2, 3, \dots, (n - 1) \\m &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l\end{aligned}$$

Como veremos más adelante, los números cuánticos n, l, m caracterizan al movimiento del electrón no sólo en el átomo de hidrógeno, sino también en cualquier otro átomo.

De acuerdo a los posibles valores de los números cuánticos se determinan los distintos estados electrónicos en el átomo.

◆ Para caracterizar el estado de los electrones en los átomos se utilizan las siguientes designaciones:

n se representa por cifras
 l con letras minúsculas en correspondencia con el
esquema:

l0	1	2	3	4	5
			↓			
ls	p	d	f	g	h

◆ Las primeras cuatro letras coinciden con las designaciones de las series espectrales

◆ Estas surgen de las transiciones de los electrones que correspondan a determinados valores del número cuántico l .

◆ Las dos últimas letras son tomadas por estar en el alfabeto después que la f .

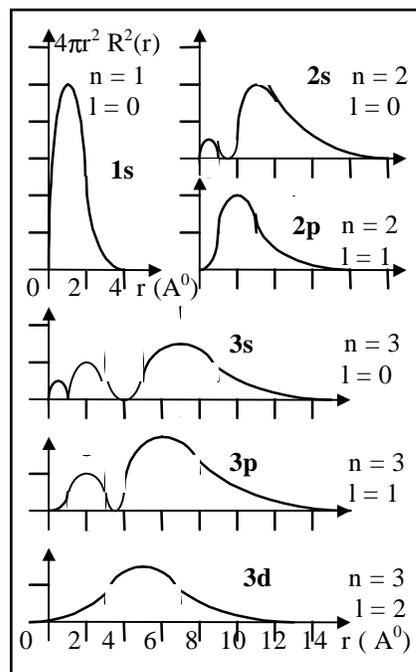
◆ De esta forma, la escritura $1s$ debe entenderse como la representación del electrón que tiene $n = 1, l = 0$, la escritura $2p$ como la representación del electrón que tiene $n = 2; l = 1$, etc.

◆ El número de electrones en el átomo con valores dados n, l se da con el índice en la parte superior. Así la escritura $2s^2$ muestra que en el átomo hay dos electrones con $n = 2; l = 0$

Retomemos las expresiones resultantes de la solución de la ecuación de Schrodinger para el átomo de hidrógeno en el caso más general. En particular, en la expresión de la función R , se ve que los números cuánticos n, l entran en la misma. Por eso ellos determinan la **función de la distribución radial de la probabilidad de estancia del electrón en el átomo.**

Las gráficas de estas funciones para el átomo de hidrógeno se muestran en las siguientes figuras:

- ♦ En el eje de las coordenadas están situados los valores de R^2 (r), multiplicados por $4\pi r^2$.
- ♦ Las magnitudes dadas caracterizan la probabilidad de estancia del electrón en una fina capa esférica de radio r , esta probabilidad es proporcional a $4\pi r^2 R^2(r) dr$ donde dr es el espesor de la capa.



Distribución radial de la probabilidad de estancia del electrón para distintos estados del átomo de hidrógeno.

♣ De la figura se deduce que a diferencia de la teoría de Bohr-Sommerfeld, de acuerdo con la cual el electrón se mueve por órbitas predeterminadas, la mecánica cuántica nos muestra que **el electrón puede encontrarse en cualquier parte del átomo**. Sin embargo, **la probabilidad de su estancia en distintas zonas del espacio no es igual**, de esta forma, si pudiéramos observar el electrón en el átomo veríamos que se encuentra más frecuentemente en unas zonas que en otras.

♣ Por eso a las representaciones modernas les corresponde el concepto de la **nube electrónica**, cuya **densidad** en distintos puntos está determinada por la magnitud Ψ^2 .

♣ Por eso en la literatura científica en vez de utilizar el término órbita, ahora se utiliza el término **orbital**, correspondiendo a cada orbital una determinada función de ondas Ψ .

Es posible representar **las nubes electrónicas para los distintos estados de los electrones**.

- Las figuras representan la forma de las superficies que limitan el espacio, en el cual esta encerrada gran parte de la nube electrónica ($\approx 90\%$). Nótese que La forma de estas superficies se determina por la componente angular de la función de ondas: $\Theta(\theta)$. $\Phi(\varphi)$.

