

**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.

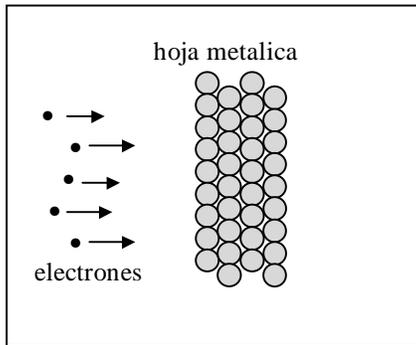
Cualquier modelo de átomo que se propusiera por entonces debía poder explicar los espectros atómicos. En base a su modelo, Thomson pudo dar cuenta de la emisión de luz por los átomos en base a suponer que, cualquier modo de excitación de los mismos debía imprimir movimiento a sus cargas constitutivas.

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.**

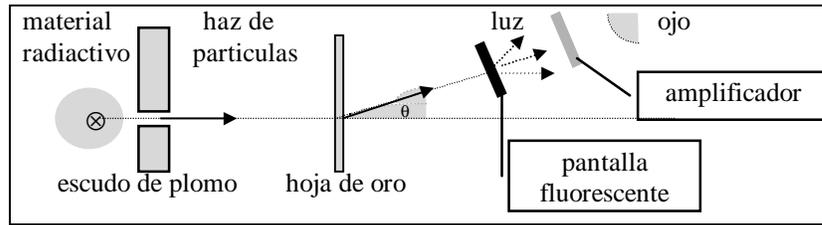
## El origen del átomo nuclear: Rutherford

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  $\alpha$  emitidas por varios materiales radiactivos en vez de electrones como partículas de bombardeo. Rutherford y sus colaboradores habían mostrado previamente que las partículas  $\alpha$  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.

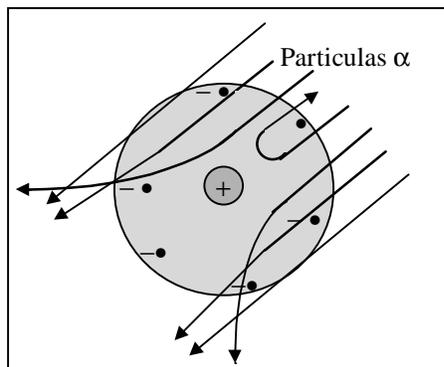
Como blanco utilizaron una delgada hoja de oro. El oro tiene ventajas sobre otros materiales: se forja con facilidad en hojas muy delgadas.



**diagrama del experimento de Geiger-Marsden**

El emisor de partículas radiactivas  $\alpha$  fue blindado con plomo, y sólo se permitía emerger una porción de las partículas  $\alpha$  como un haz angosto. Este haz incidía sobre la hoja de metal. Como detector de las partículas  $\alpha$ , se utilizó una pequeña pantalla fluorescente. Cuando una partícula  $\alpha$  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  $\alpha$  dispersadas a diferentes ángulos.

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



**Algunas de las partículas  $\alpha$  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  $\alpha$ .

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,  $1.60 \times 10^{-19}$  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.

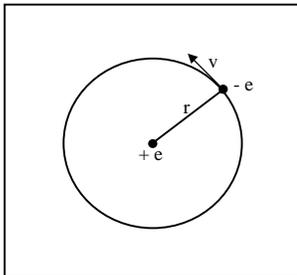
Aunque estos argumentos cualitativos indicaron que deberíamos aceptar un modelo nuclear para el átomo, el conocimiento científico requiere algo más que conclusiones basadas exclusivamente en razonamientos cualitativos. La comunidad científica prefiere deferir la aceptación de un modelo hasta que pueda 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  $\alpha$  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;  $\epsilon_0$  permisividad del vacío y  $e$  la carga eléctrica.

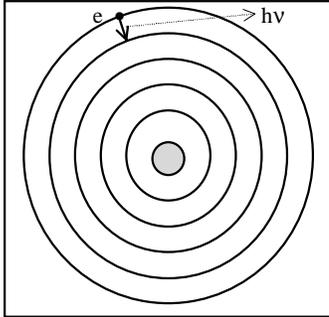
La energía cinética del electrón puede escribirse a partir de ello como:

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

- **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:

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

**$\lambda$  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**

$2\pi$

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.**

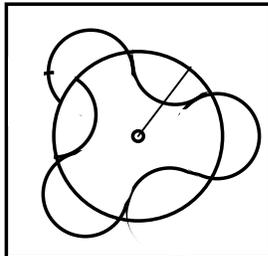
Vinculó la **longitud de onda  $\lambda$  de un electrón** (onda) y el **momento p de una partícula** mediante la **constante de Planck** en una relación análoga a la del fotón:

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

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:

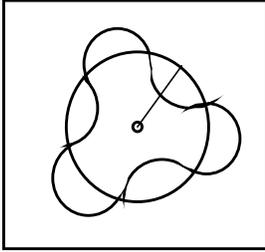
- **dado que un electrón orbitando actúa como onda, su  $\lambda$  tiene que estar relacionada con la circunferencia de su órbita.**
- **el electrón debía ser una onda que se interfiere a sí misma. Sólo si la interferencia de la onda es constructiva (resonancia), puede la órbita electrónica mantenerse 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  $\lambda_{DeB}$  ;  $2.\lambda_{DeB}$  ;  $3.\lambda_{DeB}$  ; 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:

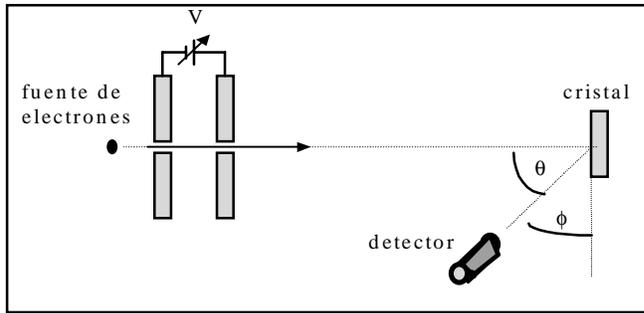
$$m.v.r = n.h./2\pi$$

## 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:

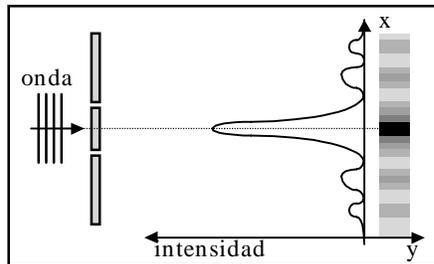
A un haz de electrones se le da una energía conocida. Se acelera a los electrones a través de un diferencia de potencial  $V$ . Davisson y Germer efectuaron mediciones del número de electrones dispersados por el cristal de níquel sobre el que hacían incidir el haz.

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:

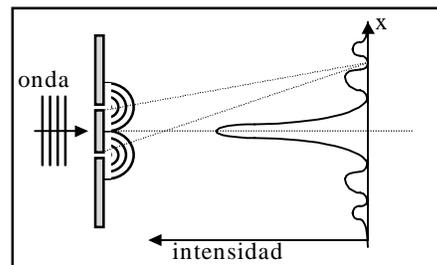
- **la dispersión del haz de electrones por un cristal podía compararse a los fenómenos de difracción e interferencia luminosa mediante una red.**
- **los electrones se reflejaban de la misma manera que debían ser reflejadas las ondas de De Broglie; por lo tanto se concluyó que los electrones tienen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

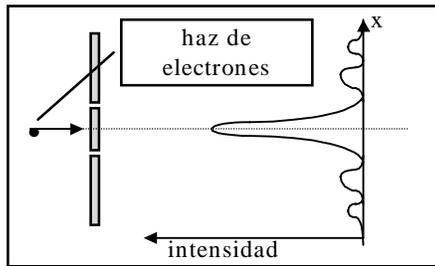


**Interferencia de ondas luminosas**

**Patrón de intensidad distancia para el fenómeno de interferencia.**



**S. MARCHISIO**



**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  $\psi$  (psi).

La función de onda caracteriza el estado de la micropartícula. La expresión para  $\psi$  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;  $\nabla^2$  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  $\psi$  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  $\omega$ :

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

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  $\psi$  :

**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  $\psi$ .
- ◆ La intensidad de la onda se encuentra haciendo  $\psi^2$ . En los casos en que  $\psi$  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  $\psi$  (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.**

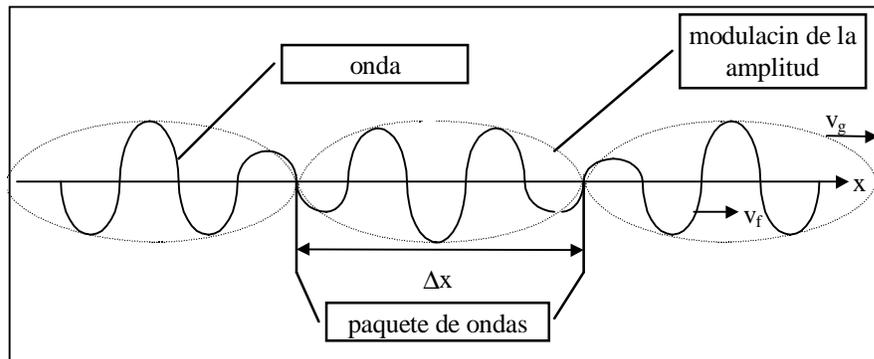
⇒ La dualidad onda -partícula puede ser comprendida mejor suponiendo que el electrón puede ser representado por una combinación de trenes de onda de diferentes frecuencias entre  $\omega$  y  $\omega + \Delta \omega$ ; y diferentes números de onda entre  $k$  y  $k + \Delta k$ . Podemos estudiar esto,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

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

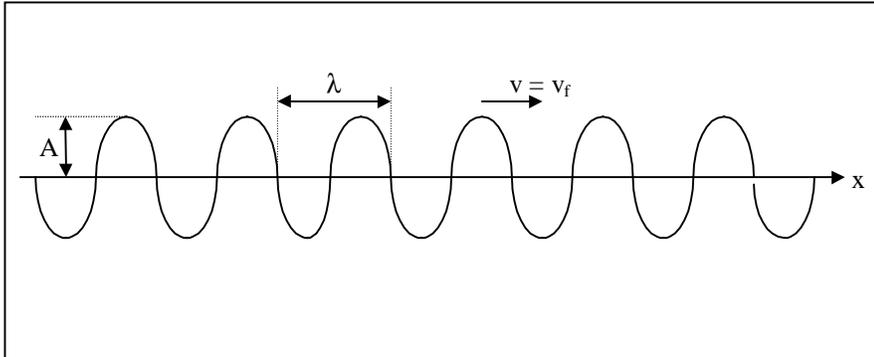
Esta expresión describe una onda senoidal, de frecuencia intermedia entre  $\omega$  y  $\omega + \Delta \omega$ , con una amplitud levemente modulada por una función coseno.



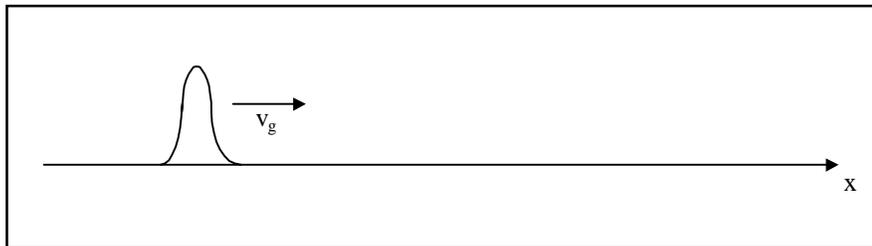
De este modo podemos distinguir lo que se llama un “**paquete de onda**”

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

- ◆ Supongamos que  $\omega$  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  $\Delta k$  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  $\omega$  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  $\omega$  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.