

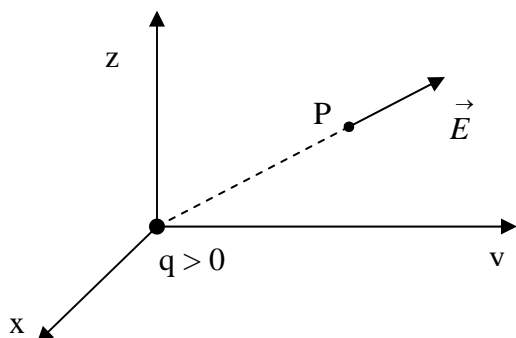
# TEMA 1 ORÍGENES DE LA TEORÍA CUÁNTICA

## 1. Introducción

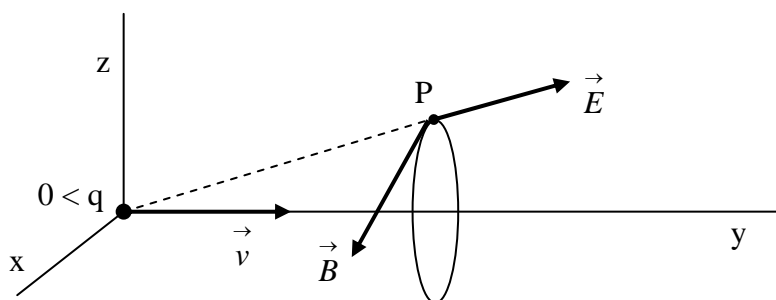
A finales del siglo XIX y durante el primer cuarto del siglo XX se acumuló cierta evidencia experimental de que la interacción de la radiación electromagnética con la materia no estaba totalmente de acuerdo con las leyes del electromagnetismo, sintetizadas en las ecuaciones de Maxwell para el campo electromagnético. Al mismo tiempo se estaba desarrollando la teoría de la estructura atómica de la materia, principalmente como resultado del descubrimiento del electrón y de la confirmación del modelo nuclear para el átomo. Otra serie de experimentos obligó a los físicos a revisar sus conceptos sobre el movimiento de partículas subatómicas, ya que éste no se ajustaba a la mecánica newtoniana. Para explicar las nuevas observaciones, determinados físicos relevantes incorporaron, más o menos ad hoc, una serie de nuevas ideas.

## 2. Revisión del concepto de radiación electromagnética

La mejor forma de describir la interacción electromagnética entre dos partículas cargadas es hacerlo en función de los conceptos de campo eléctrico y campo magnético producidos por las cargas. Cuando una partícula cargada está en reposo respecto a un observador inercial, éste mide, en un punto P, un campo que se denomina campo eléctrico de la carga ( $\vec{E}$ ).



Sin embargo, si la carga  $q$  está en movimiento respecto al observador, éste nota un campo diferente, denominado campo electromagnético de la carga. Uno de los componentes del campo se sigue llamando campo eléctrico, mientras que el otro se denomina campo magnético ( $\vec{B}$ ).



Asimismo, cuando una partícula, cargada con una carga  $q$ , se mueve en el campo electromagnético producido por otras cargas, experimenta una fuerza dada por

$$\vec{F} = q \left( \vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B} \right) \quad (1.1)$$

Siendo  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  los campos eléctrico y magnético, respectivamente, medidos por el observador y  $\vec{v}$  la velocidad de la partícula cargada  $q$  relativa al observador.

Se necesita energía para establecer un campo electromagnético. La energía por unidad de volumen (densidad de energía,  $\rho$ ) de un campo electromagnético en el vacío es

$$\rho = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 \quad (1.2)$$

donde  $\epsilon_0$  y  $\mu_0$  son la permitividad y la permeabilidad del vacío, respectivamente.

La energía de un campo electromagnético estático (que no varíe en el tiempo) permanece constante. Sin embargo, cuando el campo depende del tiempo, la energía electromagnética también depende de éste en cada punto del campo. Las variaciones de un campo electromagnético en el tiempo dan lugar a ondas electromagnéticas que se propagan con velocidad

$$c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0} = 310^8 \text{ m/s} \quad (1.3)$$

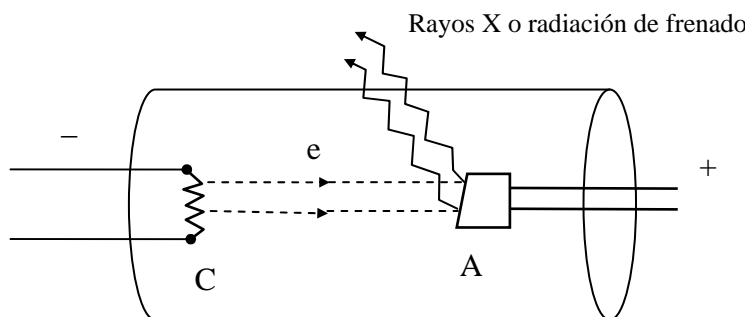
(que es igual a la velocidad de la luz en el vacío).

Podemos decir que la onda electromagnética lleva la energía del campo electromagnético. Esta energía transportada por una onda electromagnética se denomina a veces radiación electromagnética.

Puesto que una carga en reposo, respecto a un observador, produce un campo estático, la carga no irradia energía electromagnética. Se puede demostrar también que una carga en movimiento rectilíneo uniforme no irradia energía electromagnética porque la energía total de su campo electromagnético permanece constante. Cuando una carga está en movimiento acelerado se presenta una situación totalmente diferente. La energía total del campo electromagnético de una carga acelerada varía con el tiempo. Por tanto, “una carga acelerada irradia energía electromagnética”.

Una conclusión importante es que para mantener la carga en movimiento acelerado se le debe suministrar energía para compensar la que se transfiere como radiación.

Si la partícula se frena en vez de acelerarse, la energía radiada es igual, en valor absoluto, al incremento de energía que tiene el campo electromagnético como consecuencia de la disminución de velocidad de la carga. Éste es, por ejemplo, el origen de los rayos X



Tubo de rayos X

La energía radiada por una partícula cargada puede ser absorbida por otras partículas cargadas que están sujetas a la acción del campo electromagnético producido por la primera partícula. Podemos describir entonces la interacción de dos partículas cargadas como el intercambio de energía mediante la emisión y absorción de radiación. Por ejemplo, los electrones oscilantes de la antena de una radioemisora irradian energía; mientras que los de la antena de un radioreceptor absorben parte de esta energía dando lugar a una señal en la estación receptora.

El análisis de los procesos de emisión y absorción de la radiación (es decir, de la interacción radiación-materia) constituye la parte neurálgica en la comprensión del comportamiento de la materia. La física cuántica apareció, fundamentalmente, como resultado del análisis de dichos procesos.

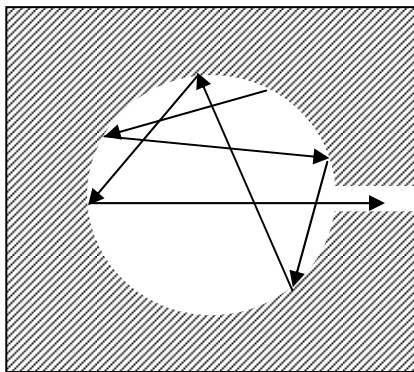
### 3. ORÍGENES DE LA TEORÍA CUÁNTICA

En este apartado vamos a presentar algunos de los trabajos pioneros que condujeron a la mecánica cuántica y a sus aplicaciones químicas más importantes.

#### 3.1 Radiación del cuerpo negro

Cuando un sólido se calienta a una cierta temperatura  $T$ , emite radiaciones electromagnéticas (de las cuales la luz visible es una posibilidad determinada). Los experimentos muestran que la radiación consiste en una gama de diferentes longitudes de onda, apareciendo cada una de ellas con diferente intensidad. Normalmente, para cada temperatura, existe una determinada frecuencia (y por tanto, una determinada longitud de onda) para la cual la densidad de energía de la radiación presenta un máximo.

Un cuerpo negro es un hipotético material que tiene la capacidad de absorber cualquier radiación incidente y, por tanto, también la misma capacidad de emitir cualquiera de estas radiaciones. Lo más cercano al concepto ideal de un cuerpo negro es una cavidad en el seno de un determinado material. Cuando el material se calienta a una temperatura  $T$ , las paredes de la cavidad se encuentran a la misma temperatura y los átomos que componen las paredes de la cavidad están emitiendo radiación electromagnética y, al mismo tiempo, están absorbiendo la radiación emitida por otros átomos de las paredes. El campo de la radiación electromagnética ocupa toda la cavidad. Cuando la radiación encerrada dentro de la cavidad alcanza el equilibrio con los átomos de las paredes, la cantidad de energía que emiten los átomos en la unidad de tiempo es igual a la que absorben.



Por tanto, cuando se alcanza esta situación de equilibrio, la densidad de energía del campo electromagnético en el interior de la cavidad es constante. Los experimentos han mostrado que, en el equilibrio, la radiación electromagnética encerrada tiene una distribución de energía (un espectro) bien definido; es decir, a cada frecuencia corresponde una densidad de energía,  $\rho_w$  que depende únicamente de la temperatura de las paredes y es independiente del tipo de material en cuyo seno se encuentra la cavidad. En la figura 1.1 se muestra cómo varía la densidad de energía con la longitud de onda para diferentes temperaturas de las paredes de la cavidad.

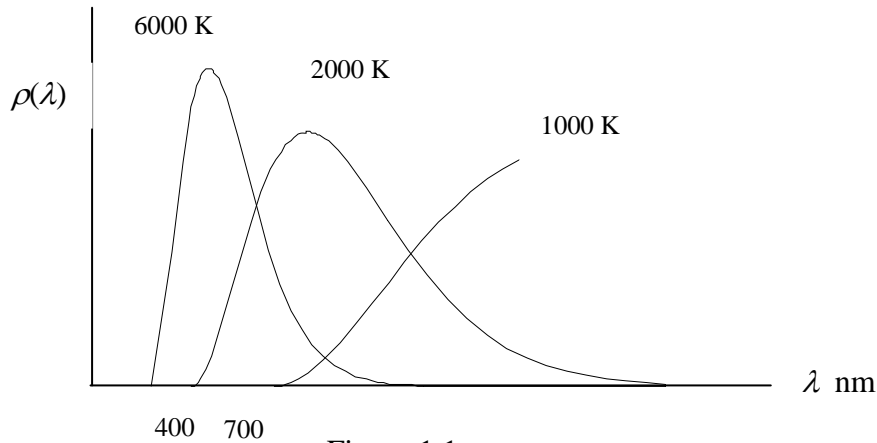


Figura 1.1

El espectro de la figura anterior indica que a temperatura 6000 K la radiación del cuerpo negro es muy parecida a la emitida por el Sol; una parte muy importante de ella cae dentro de la zona del espectro electromagnético conocido como luz visible (aproximadamente  $400 \text{ nm} \leq \lambda \leq 700 \text{ nm}$ ).

Aunque muchos físicos trataron de encontrar una explicación teórica de los detalles del espectro de la radiación del cuerpo negro, ninguno de los intentos basados en la física clásica dio su fruto. Se sabía que la densidad de energía asociada a la radiación del cuerpo negro obedecía una relación general del tipo

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} F(x) d\nu \quad (1.4)$$

donde  $\rho(\nu)d\nu$  es la densidad de energía de la radiación teniendo una frecuencia entre  $\nu$  y  $\nu+d\nu$ ,  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío y  $F(x)$  era alguna función (desconocida) de  $x = \nu/T$ .

Todos los intentos teóricos, derivados de la física clásica, para caracterizar la función desconocida  $F(x)$  conducían a expresiones que predecían lo que fue denominado “catástrofe ultravioleta”, es decir,  $\lim_{\nu \rightarrow \infty} \rho(\nu) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \rho(\lambda) = \infty$ .

La teoría clásica no podía predecir el máximo que, para cada temperatura, mostraba el espectro experimental de la radiación del cuerpo negro (ver figura 1.1).

En 1900 el termodinámico Max Planck obtuvo una fórmula empírica para  $F(x)$ :

$$F(x) = \frac{k\beta}{e^{\beta x} - 1} \quad (\text{con } x = \nu/T) \quad (1.5)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzman,  $k = R/N_A$ , y  $\beta$  era una constante empírica cuyo significado desconocía en aquel momento.

Planck supuso que los átomos radiantes de la cavidad del cuerpo negro se comportaban como pequeños osciladores armónicos, cada uno de ellos con una frecuencia dada  $\nu$ . Propuso entonces dos nuevas ideas NO CLÁSICAS:

a) Cada uno de los osciladores tiene un conjunto discreto de posibles valores de energía dado por

$$\varepsilon_n = nh\nu \quad (1.6)$$

Donde  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , y  $h$  es una constante independiente de la composición material del cuerpo negro.

A diferencia de la física clásica (la cual permite un continuo de energías para  $\varepsilon_n$ ) la fórmula de Planck<sup>1</sup>, ecuación (1.6), implica que la energía de los osciladores está cuantizada, es decir, existe en paquetes de tamaño  $h\nu$ .

b) La emisión o absorción de radiación está asociada con transiciones, o saltos, entre dos “niveles” diferentes de energía. Cada emisión o absorción implica pérdida o ganancia de un *quantum* de energía radiante de valor  $h\nu$ .

Planck calculó la energía promedio de un oscilador (utilizando la ecuación (1.6) y haciendo uso de la estadística clásica de Maxwell-Boltzmann) para demostrar que la constante  $\beta$  en la ecuación (1.5) era simplemente  $h/k$ . Así obtuvo (teniendo en cuenta que  $x = \nu/T$ )

$$F(x) = \frac{h}{\frac{h\nu}{e^{kT}} - 1}$$

y, por tanto,

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3 (e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)} \quad (1.8)$$

La constante  $h$  (ahora conocida como constante de Planck) tiene las dimensiones de una acción (energía  $\times$  tiempo). El valor numérico actual es  $h = 6.626196 \cdot 10^{-34}$  J.s.

Aunque el resultado plasmado en la ecuación (1.8) es correcto, debe señalarse que las hipótesis realizadas por Planck para su obtención no lo son, y únicamente una compensación fortuita de errores condujo al resultado satisfactorio de la densidad de energía para la radiación del cuerpo negro. Una correcta interpretación teórica de la fórmula (1.8) fue llevada a cabo, más tarde, por Einstein haciendo uso de la estadística de Bose-Einstein.

### EJERCICIO 1.1

Expresar la densidad de energía de la radiación del cuerpo negro en función de la longitud de onda, en lugar de en función de la frecuencia (ecuación (1.8)).

Solución. 
$$\rho(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp[hc/(\lambda kT)] - 1}$$

Ayuda. Definimos  $\rho(\lambda)$  conforme a la relación  $\rho(\lambda)d\lambda = -\rho(\nu)d\nu$ . El signo menos se debe a que  $d\lambda$  y  $d\nu$  tienen signos opuestos mientras que  $\rho(\lambda)$  y  $\rho(\nu)$  son positivos.

<sup>1</sup> La idea de Planck, plasmada en la ecuación (1.6), no es correcta del todo; ya que hoy día se sabe que la energía del oscilador armónico viene dada, como se verá más adelante, por  $\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2}) h\nu$ , siendo, por tanto, la energía residual  $\varepsilon_0 = (0 + \frac{1}{2}) h\nu \neq 0$ .

De  $v=c/\lambda$  se tiene  $dv/d\lambda = -c/\lambda^2$  y, por consiguiente,  $\rho(\lambda) = -\rho(v) \frac{dv}{d\lambda} = \rho(v) / \lambda^2$ .

### EJERCICIO 1.2

A partir de la expresión de  $\rho(\lambda)$ , obtenida en el ejercicio anterior, encontrar la longitud de onda para la cual la densidad de energía monocromática de la radiación del cuerpo negro es máxima a una temperatura dada. Es lo que se conoce como ley de desplazamiento de Wien.

*Ayuda.* Utilizando la ecuación  $\rho(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp[hc/(\lambda kT)] - 1}$  y haciendo el cambio de

variables  $\lambda = \frac{hc}{xkT}$ , obtenemos  $\rho(x) = \frac{8\pi k^5 T^5}{c^4 h^4} \frac{x^5}{e^x - 1}$ . De acuerdo con el concepto de

máximo:  $\frac{d\rho(x)}{dx} = 0$ . Así, obtenemos la ecuación  $x e^x - 5 e^x + 5 = 0$ ; cuya solución (con

Mathematica) es  $x = 4.9651$ . Llevando este valor de  $x$  a la expresión  $\lambda = \frac{hc}{xkT}$ ,

obtenemos la solución  $\lambda T = b$  (siendo  $b$  la constante  $hc/(4.9651 k) = 2.8978 \cdot 10^{-3}$  m K

*Nota.* Observar cómo a medida que la temperatura del cuerpo negro aumenta, de acuerdo con la figura 1.1, el máximo de la distribución de energía se desplaza hacia longitudes de onda más cortas.

### EJERCICIO 1.3

Obtener la densidad total de energía de la radiación de un cuerpo negro en función de la temperatura. Es decir, obtener lo que se conoce como ley de Stefan-Boltzman  $E = \alpha T^4$ .

*Ayuda.*

$$E = \int_0^{\infty} \rho(v) dv = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{v^3 dv}{\exp(hv/kT) - 1} = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

(Donde en la última igualdad hemos hecho el cambio  $v = xkT/h$ ). El valor de la

integral  $\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$  es 6.4938.

La constante  $\alpha$  resulta ser  $51.9504 \pi k^4 / (c^3 h^3) = 7.5643 \cdot 10^{-16} \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-4}$

## 3.2 Efecto fotoeléctrico

En 1887, investigando la descarga eléctrica entre dos electrodos como fuente de ondas electromagnéticas, Hertz observó que la intensidad de la descarga aumentaba cuando se iluminaba los electrodos con luz ultravioleta. Este efecto sugirió que las superficies iluminadas emitían más electrones. Un año más tarde Hallwachs observó emisión electrónica cuando iluminaba las superficies de ciertos metales como zinc, rubidio, potasio y sodio. El proceso por el cual se liberan electrones de un material por la acción de la radiación electromagnética se denomina efecto fotoeléctrico. La emisión electrónica aumenta cuando aumenta la intensidad de la radiación incidente, pero para cada metal hay una frecuencia característica (frecuencia umbral) por debajo de la cual la emisión no se produce. La figura 1.2 muestra un dispositivo experimental en el cual se produce corriente continua como consecuencia de la fotoemisión.

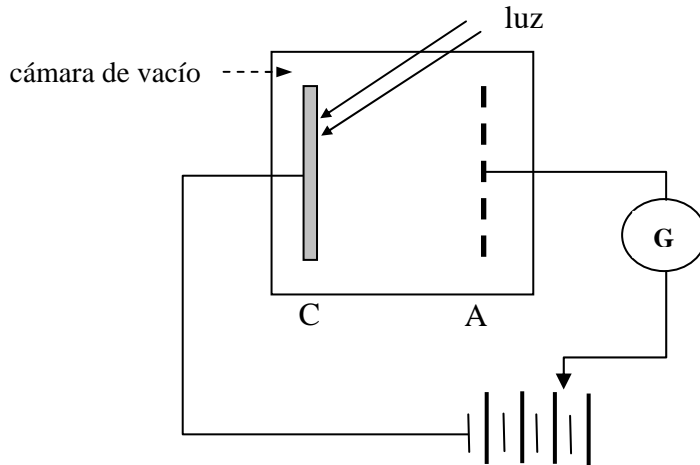


Figura 1.2

Cuando la radiación incide sobre el cátodo C, una fotocorriente fluye de él hacia el ánodo A, y dicha corriente es detectada por un galvanómetro muy sensible G.

Es imposible explicar este resultado experimental a partir de la teoría clásica de la luz como simples ondas electromagnéticas. En 1905 Einstein propuso una explicación para la forma en que la emisión fotoeléctrica depende de la frecuencia de la radiación. Einstein postuló que la energía radiante (asociada a la radiación electromagnética) estaba, ella misma, cuantizada; es decir, la radiación consistía de *cuantos o paquetes de luz* (llamados *fotones* por Lewis en 1926) con energía igual a  $h\nu$ . Como puede apreciarse, Einstein sugirió que los electrones libres del metal que actuaba de cátodo, en su interacción con la radiación electromagnética, se comportaban de la misma forma que la propuesta por Planck para los osciladores armónicos, en relación con la radiación del cuerpo negro. Asumiendo que los electrones en un metal presentan un comportamiento semejante a un gas de electrones moviéndose libremente dentro del metal, la energía  $h\nu$  del fotón debe ser usada para compensar la atracción del metal sobre el electrón (energía de ionización del metal, EI) y para comunicar (caso de que  $h\nu$  exceda a EI) al electrón libre una cierta energía cinética<sup>2</sup>. Matemáticamente:

$$h\nu = \phi + \frac{1}{2}m_e v_{\max}^2 \quad (1.9)$$

Siendo  $m_e$  la masa del electrón,  $v_{\max}$  la velocidad de los fotoelectrones y  $\phi$  la energía de arranque (trabajo de extracción o energía de ionización).

El modelo de Einstein implica que el trabajo de extracción está relacionado con una frecuencia umbral  $\nu_0$  por debajo de la cual la radiación incidente no es capaz de arrancar electrones.

$$\phi = h\nu_0 \quad (1.10)$$

Combinando las ecuaciones (1.9) y (1.10) obtenemos

<sup>2</sup> En el caso de que la fotoemisión sea posible, los electrones que abandonen el metal serán aquellos menos fuertemente ligados (los más superficiales); es decir, aquellos que requieran la EI para ser arrancados. Por tanto, la cantidad de energía residual de  $h\nu$  comunicará a los electrones arrancados la máxima energía cinética posible.

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2}m_e v_{\max}^2 \quad (1.11)$$

La energía cinética máxima de los fotoelectrones,  $(1/2)m_e v_{\max}^2$ , fue determinada midiendo el mínimo potencial electrostático,  $V_0$ , requerido para impedir el flujo de fotoelectrones. Esta es la razón por la que  $V_0$  se conoce como potencial de frenado. Por consiguiente, podemos igualar la energía cinética máxima con la energía electrostática  $eV_0$ :

$$eV_0 = \frac{1}{2}m_e v_{\max}^2 \quad (1.12)$$

Si llevamos la ecuación (1.12) a la (1.11) tenemos

$$eV_0 = h(\nu - \nu_0) \quad (1.13)$$

La interpretación teórica de Einstein fue verificada por Millikan representando valores experimentales de  $eV_0$  frente a frecuencias  $\nu$  que provocaban fotoemisión: Se observa (ver figura 1.3) que, independientemente del metal, la representación era una recta de pendiente  $h$  (constante de Planck). Además, la intersección de dicha recta con el eje de frecuencias era diferente de un metal a otro (dicha intersección nos da la frecuencia umbral del metal).

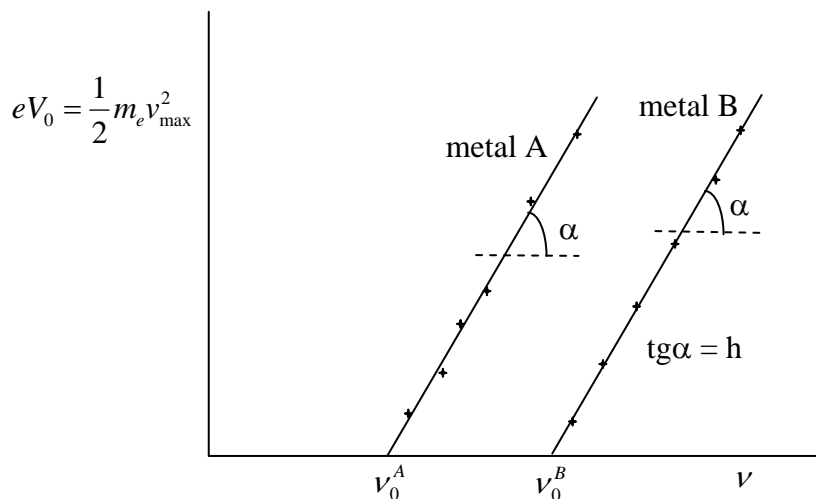


Figure 1.3

El valor de  $h$  hallado por Millikan, a partir de la pendiente de las rectas de la figura 1.3, coincide perfectamente con el hallado en la radiación del cuerpo negro. A partir de la constante de Planck resultará útil definir una nueva constante en la forma  $\hbar = h/(2\pi)$ . Usando esta notación, la energía  $E$  de un fotón puede ser expresada como

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = \hbar\omega \quad (1.14)$$

Donde  $\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T}$  es la frecuencia angular.



### 3.3 El efecto Compton

La existencia de fotones fue también demostrada por los experimentos de A.H. Compton, que hacían referencia a la dispersión de rayos X por los electrones. El hecho experimental era el siguiente:

*Al analizar la radiación electromagnética que ha pasado por una región en la que hay electrones libres, se observa que, además de la radiación incidente, aparece otra radiación de frecuencia diferente. Esta nueva radiación (radiación dispersa) tenía menor frecuencia (y por tanto mayor longitud de onda) que la incidente, y su dirección formaba un ángulo  $\theta$  con la dirección de la radiación incidente. La longitud de onda  $\lambda'$  de la radiación dispersada quedaba determinada, en función de la longitud de onda  $\lambda$  de la radiación incidente y del ángulo  $\theta$ , por la relación experimental*

$$\lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta) \quad (1.15)$$

Donde  $\lambda_c$  es una constante, de valor  $2,4262 \cdot 10^{-12}$  m, llamada longitud de onda Compton para electrones.

Como veremos enseguida, el efecto Compton, al igual que ocurre con el efecto fotoeléctrico, está relacionado con la interacción entre la radiación electromagnética y los electrones; lo cual provee una evidencia más acerca de la naturaleza fotónica de las ondas electromagnéticas.

Para una onda plana clásica moviéndose en el eje x, su desplazamiento a un tiempo t viene dado por la parte real del complejo

$$A(x,t) = A_0 \exp[i(kx - \omega t)] \quad (\text{donde } k=2\pi/\lambda \text{ y } \omega=2\pi/T) \quad (1.16)$$

A partir de las ecuaciones de Maxwell (física clásica) la relación entre la energía  $E$  y el momento lineal  $p$  para una onda electromagnética plana es

$$E = cp \quad (c \text{ es la velocidad de la luz}) \quad (1.17)$$

Si ahora consideramos la onda electromagnética como un fotón de energía  $E = \hbar\omega$  (ver ecuación (1.14)) y llevamos este valor a (1.17) obtenemos

$$\hbar\omega = cp \rightarrow p = \frac{\hbar\omega}{c} \quad (1.18)$$

Puesto que la radiación electromagnética se mueve a la velocidad de la luz, siguiendo la evolución de un valor constante de la fase se tiene

$$\text{fase} = i(kx - \omega t) = cte \rightarrow \frac{dx}{dt} = c = \frac{\omega}{k} \quad (1.19)$$

Llevando la ecuación (1.19) a la (1.18) obtenemos

$$p = \frac{\hbar\omega}{\omega} k \rightarrow p = \hbar k \quad (1.20)$$

La ecuación (1.20) la hemos obtenido utilizando una onda plana que se mueve en la dirección del eje x. Para una onda plana moviéndose en una dirección arbitraria tendríamos

$$A(\vec{r}, t) = A_0 \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] \quad (\text{donde } \vec{k} \text{ es el vector de onda})$$

y, por analogía, obtendríamos la expresión vectorial

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (1.21)$$

como equivalente tridimensional a la ecuación (1.20).

Veamos la dispersión Compton de un fotón de rayos X, de frecuencia angular  $\omega$  y vector de onda  $\vec{k}$ , que colisiona con un electrón, inicialmente en reposo, para dar un fotón dispersado de frecuencia  $\omega'$  y de vector de onda  $\vec{k}'$ . Como consecuencia del impacto, el electrón, inicialmente en reposo, adquiere un momento lineal  $\vec{p}_e$ .

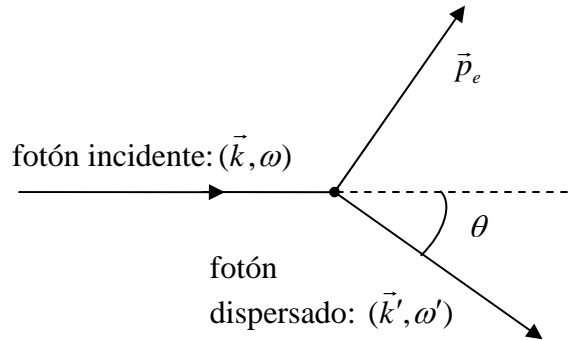


Figura 1.4

Admitiendo la conservación de la energía y la del momento lineal tendremos:

$$\text{Conservación energía:} \quad \hbar\omega = \hbar\omega' + \frac{p_e^2}{2m} \quad (1.22)$$

$$\text{Conservación momento lineal:} \quad \hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}_e \quad (1.23)$$

$$\text{De (1.23)} \rightarrow \vec{p}_e = \hbar(\vec{k} - \vec{k}') \rightarrow \vec{p}_e \cdot \vec{p}_e = p_e^2 = \hbar^2(\vec{k} - \vec{k}')^2 \quad (1.24)$$

Llevando (1.24) a (1.22) tendremos

$$\hbar(\omega - \omega') = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{k}')^2 \quad (1.25)$$

pero

$$\begin{aligned} (\vec{k} - \vec{k}')^2 &= k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta = k^2 + k'^2 - 2kk' + 2kk' - 2kk' \cos \theta \rightarrow \\ (\vec{k} - \vec{k}')^2 &= (k - k')^2 + 2kk'(1 - \cos \theta) \end{aligned} \quad (1.26)$$

De las ecuaciones (1.25) y (1.26) tenemos

$$\hbar(\omega - \omega') = \frac{\hbar^2}{2m}[(k - k')^2 + 2kk'(1 - \cos \theta)]$$

que dividida por  $\hbar\omega\omega'$  conduce a

$$\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} = \frac{\hbar}{2m\omega\omega'}[(k - k')^2 + 2kk'(1 - \cos \theta)] \quad (1.27)$$

$$\text{De (1.19)} \rightarrow c = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega'}{k'} \rightarrow \omega = ck \text{ y } \omega' = ck' \rightarrow \omega\omega' = c^2kk' \quad (1.28)$$

Llevando (1.28) a (1.27) y despreciando el término  $(k-k')^2$  frente a  $2kk'(1-\cos\theta)$  tenemos

$$\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} = \frac{\hbar}{mc^2}(1 - \cos \theta) \quad (1.29)$$

Si sustituimos  $\omega'$  y  $\omega$  por  $2\pi\nu'$  y  $2\pi\nu$ , respectivamente, y  $\hbar$  por  $h/(2\pi)$ , tendremos

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h}{mc^2}(1 - \cos \theta) \quad (1.30)$$

Finalmente, teniendo en cuenta que  $\lambda = cT = c/\nu$  y, por tanto,  $\nu = c/\lambda$ , la expresión (1.30) queda:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta) \quad (1.31)$$

Donde  $\lambda$  y  $\lambda'$  son las longitudes de onda de los rayos X antes y después de la colisión, respectivamente. Si hubiéramos realizado un tratamiento relativista, hubiéramos obtenido las mismas expresiones (1.30) y (1.31) sin necesidad de tener que hacer la aproximación (correcta)  $(k-k')^2 \ll 2kk'(1-\cos\theta)$ .

La conclusión, tanto del efecto fotoeléctrico como del efecto Compton, es que una radiación electromagnética exhibe propiedades consistentes con el concepto de fotón poseyendo simultáneamente energía  $E = \hbar\omega$  y momento lineal  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .

### 3.4 Líneas espectrales de átomos. Modelo atómico de Bohr

Cuando un elemento gaseoso es energéticamente excitado de tal forma que emite radiación, ésta, al pasar por un prisma, se desdobra en una serie bien definida de líneas que constituyen lo que denominamos su espectro. Cada línea del espectro está asociada a una longitud de onda diferente. Cuando la excitación se lleva a cabo mediante calentamiento en una llama hasta conseguir la incandescencia, el espectro así obtenido está asociado a átomos neutros, pero si la excitación es más energética (por ejemplo con una descarga eléctrica de alto voltaje) el espectro resultante está relacionado con los átomos ionizados. Además, el mismo tipo de espectro de emisión resulta de un átomo neutro de número atómico  $Z$  que de un átomo de número atómico  $Z+1$  ionizado una sola vez (ión con una carga  $+1$ ). La única diferencia consiste en que en el segundo caso las líneas espectrales se encuentran desplazadas hacia valores más altos de frecuencia. Por tanto, H y  $\text{He}^+$  tienen similar espectro, pero en  $\text{He}^+$  las líneas espectrales aparecen a frecuencias más altas que en el caso del H.

Las líneas espectrales del átomo de hidrógeno fueron obtenidas sometiendo hidrógeno molecular enrarecido ( $\text{H}_2(\text{g})$  a muy baja presión) a una descarga eléctrica de alto voltaje en un tubo Plücker, tal y como se ilustra en la figura 1.5. La descarga no sólo atomiza el hidrógeno molecular sino que, además, excita energéticamente los átomos de H posibilitando con ello una posterior emisión de radiación. Este espectro, el de H, es el espectro más simple conocido.

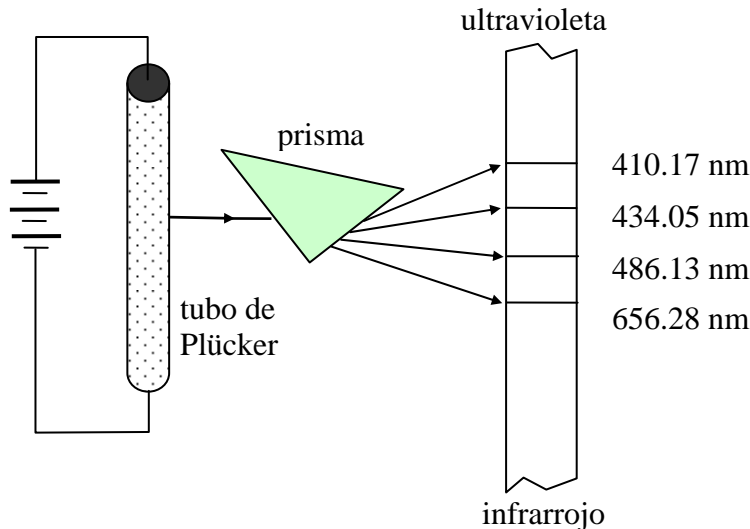


Figura 1.5

(Las líneas mostradas en el espectro de la figura 1.5 caen dentro de la zona del visible y pertenecen a la serie Balmer).

La mecánica clásica no puede proporcionar una explicación correcta para la aparición de valores discretos de frecuencia en el espectro atómico.

En 1885, J.J. Balmer encontró que la posición de las líneas espectrales del átomo de H que aparecían en la zona del visible y cerca de la región ultravioleta (la conocida como serie Balmer) podía ser ajustada empíricamente a una fórmula muy simple:

$$\lambda = \frac{m^2 A}{m^2 - 2^2} \quad (1.32)$$

donde  $A = 364.56 \text{ nm}$  y  $m = 3, 4, 5, \text{ y } 6$ .

La fórmula de Balmer fue generalizada en 1908 por Rydberg-Ritz acomodándola a las nuevas líneas espectrales descubiertas en las regiones ultravioleta e infrarrojo. La fórmula de Rydberg-Ritz tiene la forma:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{con } n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots, \text{ pero } n_2 > n_1 \quad (1.33)$$

donde  $\bar{\nu} = 1/\lambda$  es el llamado número de ondas y  $R (= 4/A)$  es la constante de Rydberg cuyo valor empírico es  $R = 109677.57 \text{ cm}^{-1}$ .

Nótese que si  $n_2 = m$  y  $n_1 = 2$ , la ecuación (1.33) reproduce la (1.32).

Una justificación teórica correcta de la expresión (1.33) fue proporcionada por Bohr a partir de su revolucionario modelo atómico.

### Modelo atómico de Bohr

Niels Bohr reunió las dos principales corrientes de la física de su época: la escuela alemana de la física teórica, de la cual son ejemplos Planck y Einstein, y la escuela inglesa de la física experimental, de Thomson y Rutherford. El modelo del átomo

nuclear, propuesto por Rutherford<sup>3</sup> en 1911, se basaba en hechos experimentales, con poca referencia a las ideas teóricas entonces generalmente aceptadas. Según la teoría electromagnética, el átomo de Rutherford “no tenía ningún derecho a existir”. Los electrones que giran alrededor del núcleo son partículas cargadas aceleradas, por lo cual debían emitir radiación de forma continua, perder energía y, por consiguiente, describir trayectorias espirales descendentes hasta caer en el núcleo (positivo).

Bohr resolvió el problema de los espectros atómicos tomando algunas ideas correctas de la época y agregando nuevas y “osadas” ideas.

Así, Bohr aceptó los principios de Conway:

- 1) Las líneas espectrales son producidas por átomos de uno en uno.
- 2) Cada línea espectral se debe a un único electrón.

Mantuvo los principios de Nicholson:

- 3) El modelo nuclear de Rutherford constituye un modelo correcto.
- 4) Las leyes cuánticas se aplican a saltos entre estados diferentes caracterizados por valores discretos de momento angular y (añadido por Bohr) de energía.

Aplicó el concepto de cuantización al momento angular del electrón:

- 5) El momento angular del electrón, describiendo órbitas circulares alrededor del núcleo, está cuantizado de acuerdo con

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad (1.34)$$

siendo  $n = 1, 2, 3, \dots$  el llamado número cuántico principal.

Presentó principios totalmente nuevos:

- 6) En los átomos existen estados estacionarios permitidos y los términos espectrales de la fórmula de Rydberg-Ritz corresponden a estos estados.
- 7) La ecuación de Planck-Einstein,  $E = h\nu$ , es válida para la emisión y la absorción. Así, si el electrón realiza una transición entre dos estados estacionarios de energías  $E_1$  y  $E_2$ , la frecuencia de la línea espectral viene dada por

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad (\text{con } E_2 > E_1) \quad (1.35)$$

Por último, Bohr propuso un concepto revolucionario que desató una gran controversia entre científicos y filósofos:

- 8) Tenemos que renunciar a todo intento de ver o explicar clásicamente el comportamiento del electrón activo durante una transición del átomo de un estado estacionario a otro.

Con todas las ideas expuestas anteriormente ya podemos dar cuerpo al modelo atómico de Bohr.

El electrón es retenido en su órbita por la fuerza electrostática que lo atrae, de acuerdo con la ley de Coulomb, al núcleo. Para un estado estacionario, esta fuerza debe compensar exactamente la fuerza centrífuga  $mv^2/r$  (siendo  $m$  la masa del electrón). Admitiendo un núcleo de carga positiva  $Ze$  ( $Z =$  número atómico) tendremos

---

<sup>3</sup> Rutherford concluyó experimentalmente que los átomos eran casi espacio vacío. Estaban constituidos por una pequeña región, muy densa y cargada positivamente (conteniendo la mayor parte de la masa del átomo) rodeada por electrones cargados negativamente.

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \rightarrow r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 mv^2} \quad (1.36)$$

De la ecuación (1.34)  $\rightarrow v^2 = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2}$  (1.37)

Llevando (1.37) a (1.36) y despejando r obtenemos  $r = \frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{\pi m e^2 Z}$  (1.38)

En el caso del hidrógeno ( $Z=1$ ), la órbita más pequeña ( $n = 1$ ) tendrá un radio

$$r_1 = a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 5.292 \cdot 10^{-11} m = 0.05292 \text{ nm} \quad (1.39)$$

(este radio  $a_0$  se denomina radio de la primera órbita de Bohr).

Para calcular los niveles de energía debemos tener en cuenta que la energía total  $E$  del electrón, en un estado estacionario dado, es la suma de las energías cinética y potencial<sup>4</sup>

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.40)$$

Despejando  $mv^2$  de la ecuación (1.36) y sustituyendo el resultado en el término  $mv^2/2$  de la ecuación (1.40) obtenemos

$$E = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (1.41)$$

(En la expresión (1.41) podemos apreciar que la energía potencial tiene doble magnitud –y signo opuesto– que la energía cinética. Este resultado se obtiene siempre que dos partículas se encuentren en equilibrio enlazadas por fuerzas centrales).

Si en la expresión (1.41) sustituimos el valor de  $r$ , dado por la ecuación (1.38), obtenemos para la energía del electrón, en cualquier estado estacionario caracterizado por el número cuántico principal  $n$ , la siguiente expresión:

$$E = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{Z^2}{n^2} \quad (1.42)$$

Llegado a este momento, estamos en condiciones de dar una interpretación teórica de la fórmula espectral de Rydberg-Ritz. En efecto, de la ecuación (1.35) se tiene

$$\nu = \frac{1}{h}(E_2 - E_1) \quad (1.43)$$

Particularizando la ecuación (1.42) para  $E_1$  y  $E_2$ , y sustituyendo el resultado en la ecuación (1.43) tenemos

---

<sup>4</sup> La energía potencial del electrón en el campo eléctrico creado por el núcleo positivo  $E_p = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r)$  es negativa porque se toma como origen de  $E_p$  el valor a  $r = \infty$ ; es decir,  $E_p(r = \infty) = 0$ . Como esta energía potencial es la mayor energía potencial posible, para cualquier otro valor posible de  $r$  tendremos  $E_p < 0$ .

$$\nu = \frac{me^4 Z^2}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

De  $\lambda = cT = \frac{c}{\nu} \rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda}$ , que llevada a la ecuación anterior (particularizada para  $Z = 1$ , átomo de H) conduce a

$$\frac{c}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \rightarrow \frac{1}{\lambda} = \tilde{\nu} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 ch^3} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (1.44)$$

La ecuación (1.44) tiene la misma forma que la ley experimental hallada por Rydberg-Ritz y, por tanto, se puede obtener, a partir de ella, un valor teórico para la constante de Rydberg,

$$R = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 ch^3} = 109737 \text{ cm}^{-1}$$

La excelente concordancia con el valor experimental 109677.58 todavía puede ser mejorada si realizamos una pequeña corrección al modelo teórico. En la obtención de la ecuación (1.44) se utilizó la masa  $m$  del electrón; pero, en realidad el electrón no gira alrededor del punto de masa estacionario dado por el centro del núcleo (protón en caso del átomo de H), sino alrededor del centro de masas del sistema núcleo-electrón. Por tanto, en la deducción debería haberse utilizado la masa reducida de las dos partículas, es decir

$$\mu = \frac{m m_n}{m + m_n} \quad (1.45)$$

siendo  $m_n$  la masa del núcleo (que en el caso más ligero, átomo de H, es 1836 veces la masa del electrón).

Utilizando la masa reducida  $\mu$ , la expresión teórica de la constante de Rydberg para el átomo de hidrógeno resulta

$$R = \frac{m e^4}{8\varepsilon_0 c h^3 (1 + m/m_n)} = 109678 \text{ cm}^{-1},$$

cuyo parecido con el valor experimental es sorprendente.

En la figura 1.6 se han dibujado los niveles de energía del átomo de H para distintos valores del número cuántico  $n$ , apareciendo como líneas verticales las transiciones que dan origen a la absorción o emisión de un cuanto de radiación.

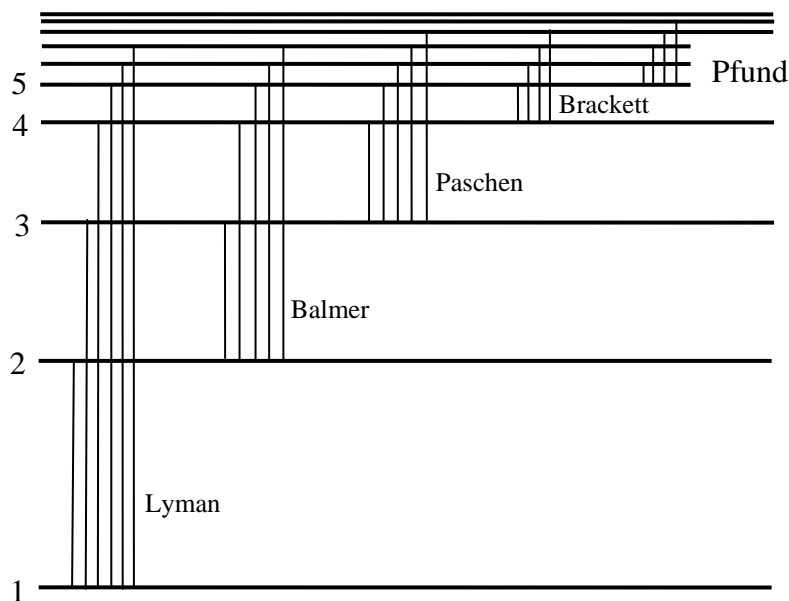


Figura 1.6

Puede observarse que los niveles de energía están más cerca unos de otros a medida que aumenta la altura sobre el nivel más bajo (llamado estado fundamental). Finalmente, puede apreciarse que estos niveles altos convergen en un límite, cuya altura sobre el nivel fundamental corresponde a una energía que es lo que llamamos energía de ionización (energía necesaria para arrancar el electrón del estado fundamental llevándolo fuera del campo del núcleo).

#### 4. Dualidad onda-partícula

Antes de 1920 la naturaleza corpuscular de los electrones parecía estar bien establecida. Los argumentos más convincentes para este punto de vista estaban basados en observaciones empíricas tales como:

- 1) Desviación de los rayos catódicos (electrones) por campos eléctricos y magnéticos y la subsiguiente medida de la ratio  $e/m$  (carga/masa) de los electrones.
- 2) Determinación de la carga (y, por consiguiente, de la masa) de un electrón mediante el experimento de la gota de aceite de Millikan.
- 3) Observación de la trayectoria de un electrón en la cámara de niebla.

Además, incluso el modelo cuántico de Bohr para el átomo de hidrógeno parecía dar soporte al concepto corpuscular del electrón orbitando alrededor del núcleo.

A partir del hecho de que los fotones asociados con ondas electromagnéticas presentaban comportamiento corpuscular (comportamiento semejante al de una partícula), Louis de Broglie sugirió que partículas tales como electrones podían presentar también comportamiento ondulatorio. Propuso que las frecuencias y los vectores de onda de estas “ondas de materia” deberían estar relacionadas con la energía



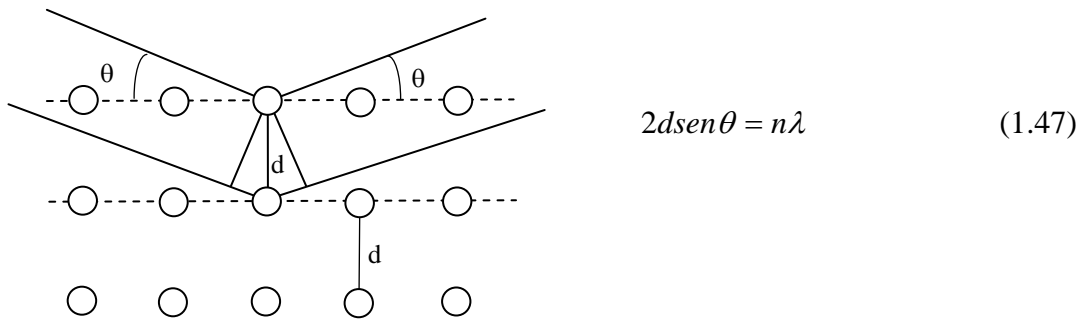
y el momento lineal de la partícula asociada, de la misma forma que en el caso del fotón<sup>5</sup>. Esto es

$$E = \hbar\omega \quad \left( = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{T} = \frac{h}{T} = h\nu \right) \quad (1.46a)$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} \rightarrow p (= mv) = \frac{h}{\lambda} \quad (1.46b)$$

En el caso de ondas de materia, las ecuaciones (1.46a) y (1.46b) son denominadas relaciones de de Broglie.

No es difícil confirmar experimentalmente la existencia de ondas de materia. Para ello, tengamos en cuenta que el rasgo fundamental que distingue las ondas de cualquier otro fenómeno físico es la capacidad que tienen para difractarse y formar interferencias. Davisson y Gerner realizaron los primeros experimentos que demostraban la difracción de las ondas de electrones por cristales de níquel. La difracción de estas ondas materiales obedecía la ley de Bragg:



Las ondas materiales (constituidas por electrones) forman interferencias constructivas, al difractarse por los planos del cristal de Ni, cuando la diferencia de camino,  $2d \sin \theta$ , es un múltiplo entero de la longitud de onda  $\lambda$ .

La ecuación (1.46b) es coherente con la cuantización del momento angular impuesta por Bohr en el modelo teórico para el átomo de H y, por tanto, modifica el concepto puramente corpuscular del electrón orbitando alrededor del núcleo. De acuerdo con de Broglie, el electrón en una órbita estable de Bohr debía ser considerado como una onda material estacionaria (de otra forma debería autoaniquilarse por formación de interferencias destructivas). Esta exigencia implica que la longitud de la órbita,  $2\pi r$ , debe ser un múltiplo entero de la longitud de onda del electrón,

$$2\pi r = n\lambda \quad (\text{con } n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.48)$$

De la ec. (1.46b)  $\rightarrow \lambda = \frac{h}{mv} \xrightarrow{\text{ec. (1.48)}} 2\pi r = n \frac{h}{mv} \rightarrow mvr = n \frac{h}{2\pi} \rightarrow L = n \frac{h}{2\pi}$ .

### 5. Principio de incertidumbre de Heisenberg

Aunque en el tema siguiente veremos una demostración general del principio de incertidumbre, es conveniente ver aquí el caso particular del principio de incertidumbre para la posición y el momento lineal.

<sup>5</sup> Ver las ecuaciones (1.14) y (1.20).

Teniendo en cuenta la dualidad onda-partícula vamos a considerar la representación de una partícula mediante una superposición de ondas. Consideremos, en primer lugar, el caso extremo de una partícula libre moviéndose en el eje  $x$ . Si la partícula no está localizada (partícula libre) puede ser representada por una onda material de longitud de onda  $\lambda$ . Gráficamente:

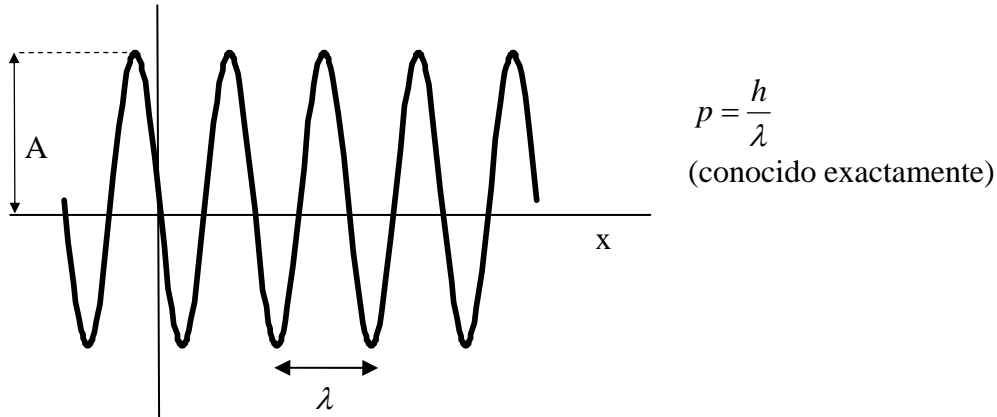


Figura 1.7

Puesto que la onda anterior se extiende de  $-\infty$  a  $+\infty$ , con una amplitud constante  $A$ , no hay ninguna zona del eje  $x$  donde la presencia de la partícula sea mayor. Esto implica que desconocemos por completo su posición.

Consideremos ahora el caso también extremo pero opuesto al anterior. Si utilizamos una superposición de todas las posibles longitudes de onda de  $\lambda = 0$  a  $\lambda = \infty$ , las ondas se refuerzan en algún valor definido de la coordenada  $x$  y se anula en cualquier otro punto del eje  $x$ . Es lo que conocemos como distribución delta de Dirac



En este caso, la posición  $x$  es exactamente conocida ( $x = x_0$ ), pero la longitud de onda, y por tanto el momento lineal  $p = h/\lambda$ , es absolutamente desconocida.

Veamos, a continuación, una situación intermedia más general. Supongamos una partícula no-libre cuyo paquete de ondas asociado sea la superposición de cierto número de ondas de diferentes longitudes de onda  $\lambda$ ; de tal forma que en cierta región  $\Delta x$  del eje  $x$  existe una acumulación de la onda resultante, siendo prácticamente nula la onda resultante fuera del intervalo  $\Delta x$ . Gráficamente:

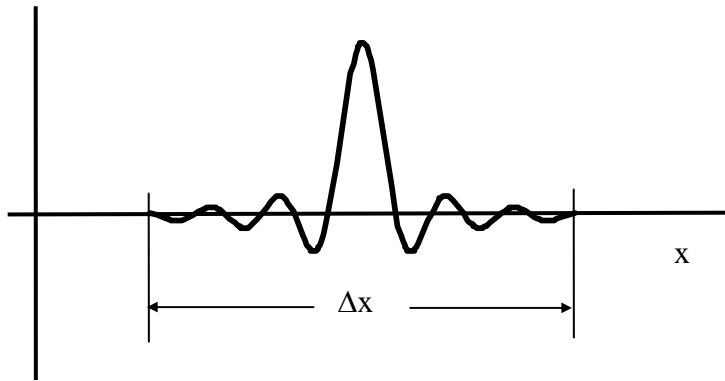


Figura 1.8

En la figura anterior vemos que existe una cierta indeterminación en la localización de la partícula, ya que a lo más que podemos aspirar es a ubicarla dentro del intervalo  $\Delta x$ . Si el paquete de ondas representado en la figura 1.8 ocupa una región  $\Delta x$  del eje  $x$ , las ondas componentes (de fórmula  $A_i(x,t) = A_{0i} \cos(k_i x - \omega_i t)$  con  $k_i = 2\pi / \lambda_i$  y  $\omega_i = 2\pi / T_i$ ), que interfieren para componer dicho paquete de ondas, tienen unas longitudes de onda que caen dentro del intervalo  $\Delta(2\pi / \lambda)$ . Además, según la teoría clásica del análisis de Fourier, debe cumplirse

$$\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right) \Delta x \geq 1 \quad (1.49)$$

De acuerdo con la ecuación de de Broglie (1.46b) tenemos  $\frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h}$ , que llevada a la

ecuación (1.49) conduce a  $\Delta\left(\frac{p}{h}\right) \Delta x \geq 1 \xrightarrow{h=cte} \boxed{\Delta p \Delta x \geq h}$  (1.50)

La ecuación (1.50), propuesta por primera vez por el físico Werner Heisenberg en 1927, es conocida como el principio de incertidumbre para la posición y el momento lineal. Podemos enunciarlo en la forma:

*“Es imposible conocer simultáneamente y con exactitud la posición y el momento lineal de una partícula”*

Este principio expresa uno de los hechos fundamentales de la naturaleza porque, como veremos en un ejemplo concreto, es inherente al proceso de medida.

Decir que una partícula está en el punto  $x$  y tiene un momento lineal  $p$ , exige la medición simultánea de la coordenada  $x$  y del momento lineal  $p$ , ya que sin esas medidas no tenemos información alguna. Pero si analizamos el proceso de medida notamos que a escala atómica no podemos medir ni la posición ni el momento lineal sin perturbar apreciablemente el movimiento de la partícula. Para ilustrar esto consideremos un experimento simple. Supongamos, por ejemplo, que queremos determinar la coordenada  $x$  de una partícula observando si la misma pasa o no por una rendija (de anchura  $b$ ) en una pantalla (ver figura 1.9). La precisión con que conocemos la posición de la partícula está limitada por el tamaño de la rendija, es decir,  $\Delta x \approx b$ .

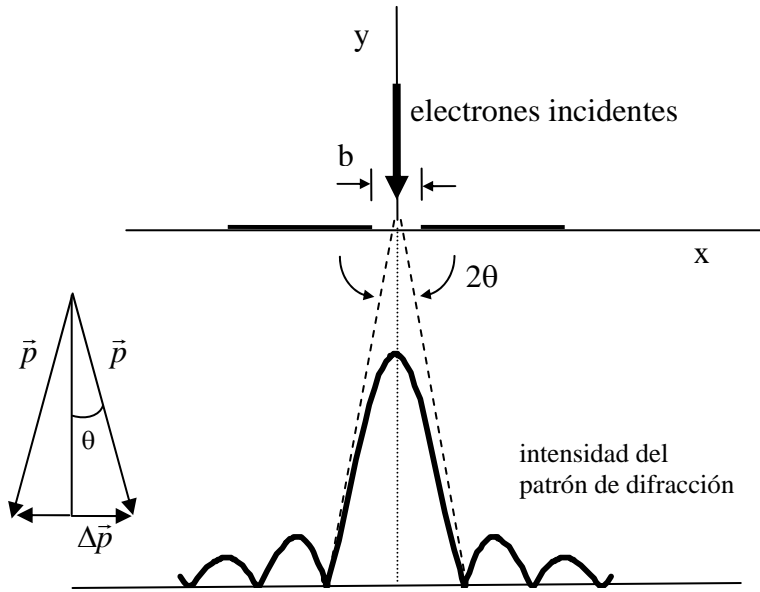


Figura 1.9

La rendija de anchura  $b$  perturba la onda material de la partícula dando lugar a un cambio en el movimiento de la misma, como se deduce del diagrama de difracción que se produce. La indeterminación en el momento lineal de la partícula, paralelo al eje  $x$ ,  $\Delta\vec{p}$ , está determinado por el ángulo  $\theta$  correspondiente al máximo central del diagrama de difracción<sup>6</sup>, ya que la partícula, después de atravesar la rendija, se está moviendo con mayor probabilidad dentro de la zona correspondiente a un ángulo  $2\theta$ . De acuerdo con los resultados teóricos de la difracción producida por una rendija rectangular, el ángulo  $\theta$  viene dado por  $\text{sen } \theta = \lambda/b$ . Por tanto,

$$\Delta p \approx p \text{sen} \theta = p \frac{\lambda}{b} \quad (1.51)$$

Llevando la ecuación (1.46b) a la ecuación (1.51) tenemos

$$\Delta p \approx \frac{h \lambda}{\lambda b} = \frac{h}{b} \xrightarrow{b = \Delta x} \Delta p \Delta x \approx h.$$

Nótese que para mejorar nuestra posibilidad de determinar la posición exacta de la partícula, debemos usar una rendija muy estrecha. Pero una rendija muy estrecha produce un máximo central muy ancho ( $\text{sen} \theta = \lambda/b$ ; si  $b \downarrow \rightarrow \text{sen} \theta \uparrow \rightarrow \theta \uparrow$ ) en el diagrama de difracción, lo cual significa una indeterminación grande en nuestro conocimiento de la componente  $x$  del momento lineal ( $\Delta p = p \text{sen} \theta$ ). Inversamente, para reducir la indeterminación en el conocimiento de la componente  $x$  de  $\vec{p}$ , el máximo central del diagrama de difracción debe ser muy estrecho ( $\theta$  pequeño). Pero de acuerdo con  $\text{sen} \theta = \lambda/b$ , un ángulo  $\theta$  pequeño implica un valor de  $b$  (y por tanto de  $\Delta x$ ) grande, lo cual da lugar a una indeterminación grande en la coordenada (posición)  $x$  de la partícula.

<sup>6</sup> El estudio de la difracción de una onda al pasar por una rendija puede encontrarse en cualquier libro de física general. Por ejemplo, Alonso-Finn, volumen II, tema 23, apartado 2.

Como vemos, a nivel atómico, la medición introduce inevitablemente una perturbación significativa del sistema.

El principio de incertidumbre implica que nunca podemos definir la trayectoria de una partícula con la precisión absoluta postulada por la mecánica clásica. La mecánica clásica sigue siendo válida para cuerpos grandes, tales como los que interesan al ingeniero, porque la indeterminación implícita en la relación (1.50) es, para un cuerpo macroscópico, mucho menor que los errores experimentales en las mediciones de  $x$  y de  $p$ , debido a la pequeñez de la constante de Planck. El concepto de trayectoria no tiene significado para partículas de dimensiones atómicas porque no se puede definir de forma precisa; se necesita, por consiguiente, una descripción del movimiento que sea diferente a la que solemos hacer en física clásica. Por esta razón, conceptos tales como velocidad, aceleración, y fuerzas son de uso limitado en la mecánica cuántica. En cambio, el concepto de energía **sí** es de importancia capital en la mecánica cuántica, ya que está más relacionado con el estado del sistema que con su trayectoria.

Para describir gráficamente el estado dinámico de una partícula, es decir, su posición y su momento lineal en cada instante, usamos un espacio representativo denominado “*espacio de fases*”. Para el caso de un movimiento unidimensional, el espacio de fases tiene dos dimensiones (abscisa  $x$  y ordenada  $p$ ). En mecánica clásica, el estado de una partícula se representa, en el espacio de fases, mediante un punto de coordenadas  $(x,p)$ , puesto que, en mecánica clásica, podemos determinar simultáneamente y con exactitud la posición y el momento lineal. Cuando a partícula se mueve, el punto representativo determina una línea en el espacio de fases que denominamos trayectoria (ver figura 1.10a).

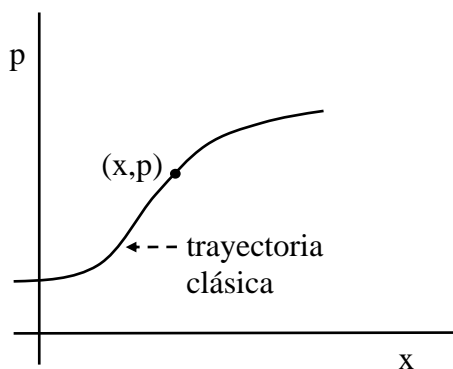


Figura 1.10a

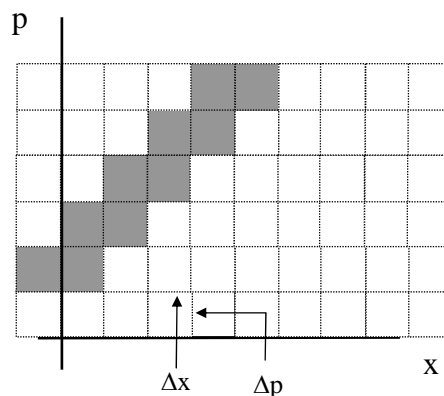


Figura 1.10b

En mecánica cuántica la situación es diferente. Dividimos el espacio de fases en celdas (rectángulos de lados  $\Delta x$  y  $\Delta p$ , y de superficie  $\Delta x \Delta p = h$ ). Por tanto, lo más que podemos afirmar es que en cada instante el punto representativo de la partícula está dentro de una de esas celdas. A medida que el tiempo transcurre, la “trayectoria” de la partícula cae dentro de un camino en forma de cinta que une una serie de celdas (ver figura 1.10b).



## PROBIEMAS TEMA 1

**1.1** Calcula la longitud de onda de de Broglie de un electrón cuando su energía es 1 eV, 100 eV, 1000 eV. ¿Qué longitud de onda se difractaría notablemente en un cristal de níquel, donde la separación atómica es aproximadamente 2.15 amström? Calcular la energía de los electrones que experimentan difracción de Bragg a un ángulo de 30°.

**1.2** Un haz de electrones son acelerados por una diferencia de potencial de 1000 voltios.  
a) Calcular la longitud de onda de de Broglie. b) Calcular la  $\lambda$  de los rayos X originados cuando estos electrones son frenados al chocar contra una superficie sólida.

*Solución.-* a) 0.0387 nm. b) 1.24 nm.

**1.3** Un fotón ultravioleta ( $\lambda = 58.4$  nm) es absorbido por una molécula de hidrógeno que está en reposo. Puesto que el momento lineal se conserva, ¿cuál es la velocidad de la molécula de hidrógeno después de absorber el fotón? ¿Cuál es la energía de translación de la molécula de hidrógeno en J/mol?.

*Solución.-* b) 0.0117 J/mol.

**1.4** La energía de arranque fotoeléctrica del potasio es 2.0 eV. Suponiendo que sobre él incide luz de  $3.6 \cdot 10^{-7}$  m de longitud de onda, hallar: a) potencial que detiene a los fotoelectrones, b) energía cinética y velocidad de los electrones arrancados más rápidos.

*Solución.-* 1.45 voltios.

**1.5** Cuando se ilumina una superficie metálica con luz de diferentes longitudes de onda, se miden los potenciales, de detención de los fotoelectrones, que se muestran en la tabla:

$10^7 \lambda$ (m)	3.66	4.05	4.36	4.92	5.46	5.79
V (voltios)	1.48	1.15	0.93	0.62	0.36	0.24

Representar el potencial de detención en función de la frecuencia de la luz. Determinar del gráfico: a) la frecuencia umbral, b) la energía de arranque fotoeléctrico del metal y c) la razón  $h/e$ .

*Solución.-* a)  $4.606 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ , b)  $3.03 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ , c)  $4.112 \cdot 10^{-15} \text{ J s/C}$

**1.6** Calcula el número de fotones emitidos por una bombilla de luz amarilla de 100 W en 1 segundo. Considerar que la longitud de onda de la luz es de 560 nm. ¿Cuánto tiempo costaría emitir un mol de fotones?

*Solución.-* a)  $2.8 \cdot 10^{20}$ , b) 35.85 minutos

**1.7** Hallar el número máximo de fotoelectrones que pueden emitirse si una superficie de potasio, con una energía umbral  $E_0 = 2.4 \text{ eV}$ , si absorbe 3250 J de radiación monocromática de longitud de onda  $\lambda = 3 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ . ¿Cuál es la velocidad máxima de los electrones emitidos?

Datos.-  $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ ;  $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ culombios}$ ;  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ ;  $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$ .

**1.8** Una radiación de  $10^{-10}$  m (1 amströn) de longitud de onda experimenta dispersión de Compton en una muestra de carbono. Se observa la radiación dispersada en dirección perpendicular a la de incidencia. Hallar: a)  $\lambda'$  de la radiación dispersada, b) energía cinética y dirección del movimiento de los electrones de retroceso.

*Solución.-* a)  $1.024 \cdot 10^{-10}$  m, b)  $4.72 \cdot 10^{-17}$  J,  $44.3^\circ$  con respecto a la radiación de incidencia.

**1.9** La energía electrónica total de un átomo es igual a la suma de las sucesivas energías de ionización. Si la 1ª y 2ª energías de ionización del litio son 5.39 y 75.619 eV, respectivamente, usa el modelo atómico de Bohr para calcular la energía electrónica total del litio. El valor experimental es -203.428 eV.

*Solución.-* -202.963 eV

**1.10** La serie Balmer del espectro de emisión del átomo de hidrógeno incluye todas las transiciones que finalizan en el nivel  $n = 2$ . Calcula la energía (en julios y en eV) de la transición Balmer de longitud de onda 486.13 nm, y determina el número cuántico  $n$  del estado emisor.

*Solución.-* a)  $4.089 \cdot 10^{-19} = 2.5556$  eV, b)  $n = 4$