| I<br>I.E.S. El Clot<br>Dto. Física y Química | **Física Cuántica** | Origen: FisQuiWeb |
|---|---|---|

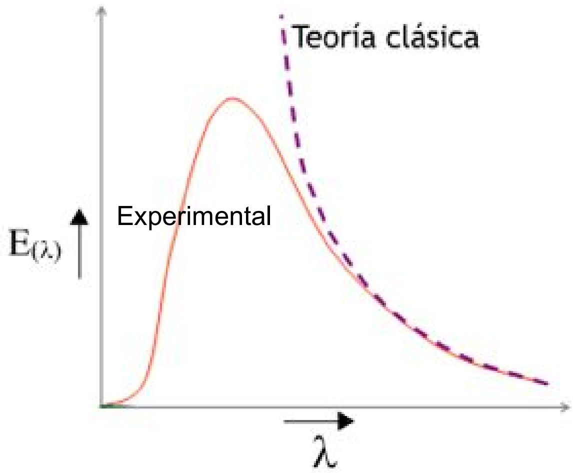
En los últimos años del s. XIX y principios del XX ***el estudio de la interacción entre la materia y las ondas electromagnéticas*** llevó a la formulación de importantes problemas cuya resolución condujo a una concepción nueva de la física que rige el comportamiento de los átomos: la ***Física Cuántica.***

Los tres fenómenos que dieron las pistas para la formulación de la Física Cuántica tenían relación con la absorción y/o emisión de ondas electromagnéticas por los átomos que constituyen la materia:

- ***Análisis del espectro de emisión de un cuerpo negro***.

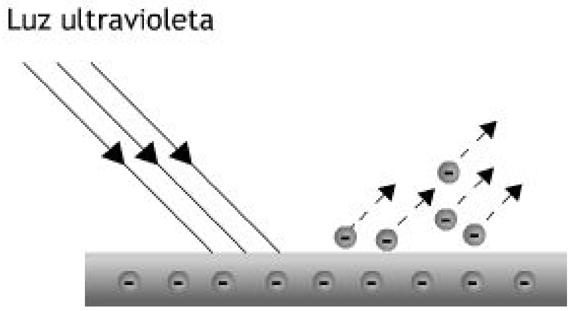
  El término "cuerpo negro" se usa en física para denominar a un emisor ideal. Esto es, un material capaz de absorber y emitir energía de todas las frecuencias. Actualmente el material que más se aproxima al emisor ideal fue fabricado en 2008 y está construido a base de nanotubos de carbono. Absorbe (y por tanto puede emitir) el 99,955% de la energía que recibe.

  *El análisis del espectro de la energía emitida por un cuerpo negro presentaba notables diferencias con lo que el modelo teórico de la física clásica predecía a finales del s XIX.*



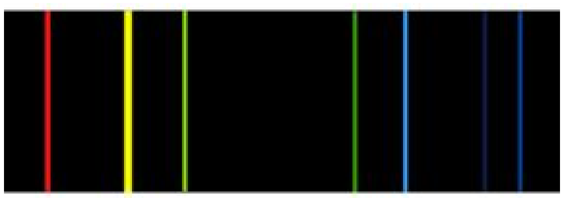

- ***Interpretación del efecto fotoeléctrico.***

  El efecto fotoeléctrico fue descubierto por Hertz en 1887 y consiste en la emisión de electrones por algunos metales cuando son iluminados con luz (generalmente ultravioleta). *La interpretación de la emisión de los llamados fotoelectrones tampoco podía ser explicada correctamente si se usaba la teoría disponible en la época.*




- ***Explicación de los espectros de emisión de los gases.***

  Cuando un gas se somete a voltajes elevados, emite luz que tras ser analizada con un espectroscopio da un espectro característico consistente en rayas de diferentes colores sobre un fondo negro. *El único modelo de átomo existente entonces (el átomo de Rutherford) predecía que el espectro debería de ser continuo, sin zonas oscuras.*



**Espectro de emisión del cuerpo negro. Teoría Cuántica de Planck**

Cuando un trozo de metal se calienta sus átomos absorben la radiación térmica y emiten radiación electromagnética. Si la temperatura no es muy alta no se aprecia cambio de color alguno en el metal, aunque desprende calor (radiación electromagnética no visible: infrarroja). Si seguimos aumentando la temperatura la radiación electromagnética emitida se corresponde con las frecuencias de la luz visible. El metal adquiere primero un color rojo oscuro, después rojo intenso, amarillo y a temperaturas elevadas podremos apreciar un amarillo muy pálido, casi blanco.

El estudio del espectro de la radiación emitida por un emisor perfecto (el cuerpo negro) condujo al enunciado de dos importantes leyes:

- ***Ley de Stefan-Boltzmann (1884)***

*"La energía emitida por unidad de tiempo y superficie (intensidad o poder emisivo) del cuerpo negro es proporcional a la cuarta potencia de la temperatura absoluta"*

$$\boxed{E = \sigma\, T^4} \qquad \sigma = 5{,}67.10^{-8}\ W\ m^{-2}\ T^{-4}$$

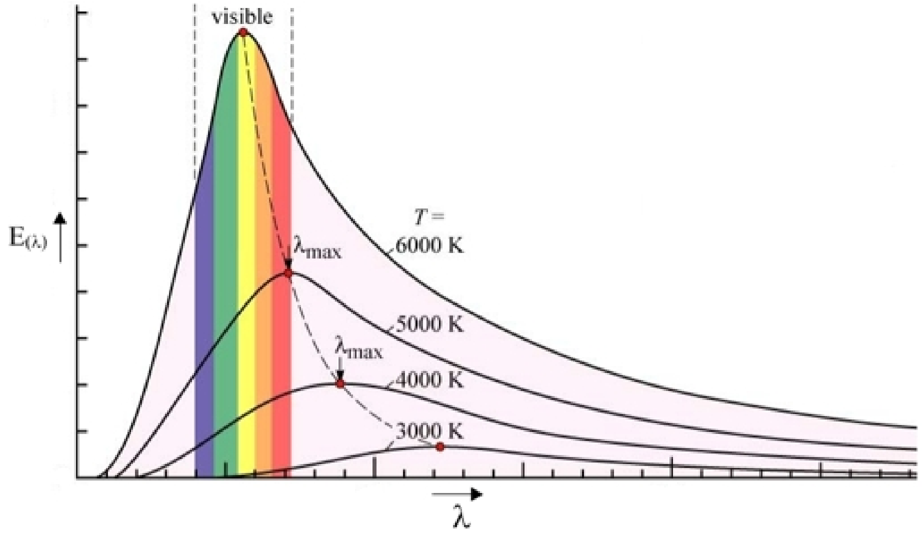
La ley de Stefan-Boltzmann establece que la intensidad de radiación aumenta muy rápidamente con la temperatura, lo que está de acuerdo con los datos experimentales.

- ***Ley de Wien (1896)***

*"El cuerpo negro emite energía para todas las longitudes de onda y la distribución de la energía radiante es tal que a una determinada longitud de onda la intensidad de emisión es máxima. Para esta longitud de onda se cumple:"*

$$\boxed{\lambda_{max}\ .\ T = 2{,}898.10^{-3}\ m\ K}$$

Según la ley de Wien el máximo de energía emitida se desplaza hacia longitudes de onda más cortas (mayores frecuencias) a medida que aumenta la temperatura del cuerpo emisor. Esto explica por qué a medida que se aumenta la temperatura el color del hierro caliente, por ejemplo, pasa del rojo al amarillo casi blanco.




**Gráfica que muestra los resultados experimentales para un cuerpo negro**

El poder emisivo (Stefan-Boltzmann) se corresponde con el área de la curva para cada temperatura. Como se ve aumenta muy rápidamente con T.

A medida que aumenta la temperatura el máximo de intensidad se desplaza hacia longitudes de onda más cortas (Wien)

Las leyes anteriores son leyes empíricas que surgen del análisis de los datos experimentales. No obstante, el desafío estaba en explicar teóricamente la forma de la curva para cada temperatura. Esto, aunque se intentó, no pudo lograrse aplicando las concepciones clásicas conocidas hasta entonces.

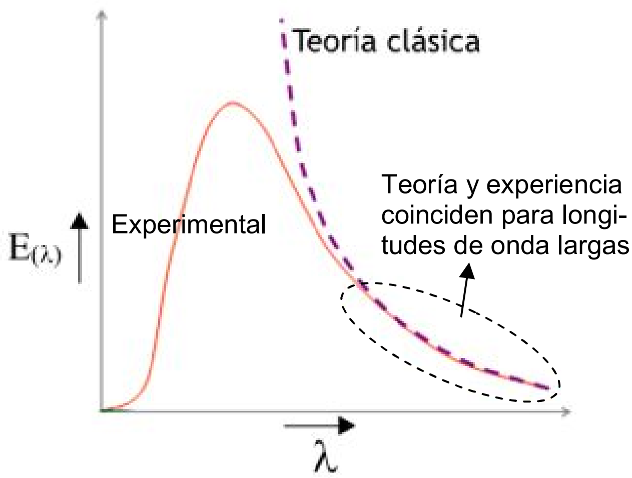
La aplicación de la mecánica, la termodinámica y la física estadística al problema planteado dio como resultado la siguiente ecuación:

$$E_{\lambda} = \frac{8\,\pi\,\nu^2}{c^3}\,k\,T$$

***La energía emitida debería crecer con el cuadrado de la frecuencia (línea de puntos).***

Los datos experimentales, sin embargo, indican que el poder emisivo cae bruscamente para longitudes de onda pequeñas (frecuencias altas). La ecuación anterior, por tanto, solamente da resultados ajustados a los datos experimentales para longitudes de onda elevadas.

Este hecho (que se conoció en la época como ***"catástrofe ultravioleta"***) no tenía solución. La teoría era incapaz de explicar los hechos experimentales.




***Max Planck*** (1858 - 1947), un científico alemán, proporcionó una solución al problema planteado.

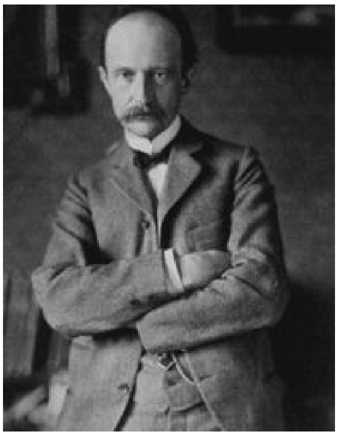
En diciembre de 1900 presentó una expresión teórica que se adaptaba muy bien a la curva experimental obtenida para la emisión de radiación por el cuerpo negro:

$$\boxed{E_{\lambda} = \frac{8\,\pi\,h\,\upsilon^3}{c^3}\,\frac{1}{e^{\frac{h\,\upsilon}{KT}} - 1}}$$

Para llegar a esta expresión Planck tuvo que introducir una extraña hipótesis:

***"Los intercambios de energía entre materia y radiación tienen lugar no de manera continua, sino por cantidades discretas e indivisibles o cuantos de energía. El cuanto de energía es proporcional a la frecuencia de la radiación":***

$$\boxed{E = h\,\upsilon} \qquad h = 6{,}626.10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$$



***Max Planck (1858-1947)***

Nobel de Física en 1918

La constante de proporcionalidad introducida, ***h***, o c***onstante de Planck*** está considerada actualmente como una de las constantes básicas de la naturaleza.

El valor de "h" marca la frontera que separa nuestro mundo (el mundo macroscópico) del mundo cuántico.

Las expresiones en las que toma parte la constante de Planck involucran energías, distancias, tiempos... etc muy pequeños. Estamos en los dominios de la física cuántica. Las leyes de la física clásica no funcionan.

Su pequeñez explica el por qué los cuantos de energía habían pasado desapercibidos a los físicos. Los pequeños "paquetes" de energía que absorben o emiten los átomos son tan sumamente pequeños que el proceso de absorción y/o emisión parece continuo. La realidad es muy distinta: ***la energía se absorbe y emite en forma de cuantos***. La absorción y emisión de energía por la materia se realiza "a saltos".

El dato curioso es que Planck llegó a la expresión correcta usando métodos incorrectos, tal y como se demostró posteriormente.

## El efecto fotoeléctrico

En el transcurso de los experimentos realizados por Hertz para producir ondas electromagnéticas observó que la intensidad de las descargas eléctricas (chispas) aumentaba cuando se iluminaban los electrodos con luz ultravioleta. ***Las superficies metálicas emitían electrones***.

La emisión de electrones por los metales (zinc, rubidio, potasio o sodio) fue comprobada posteriormente denominándose ***emisión fotoeléctrica o efecto fotoeléctrico.***

***El efecto fotoeléctrico podía explicarse suponiendo que los electrones del metal absorben energía de la luz incidente. Si la energía absorbida es la suficiente pueden "saltar" del metal venciendo las fuerzas que los mantienen ligados a él.***

- Si suponemos que la luz es una onda, la energía transferida a una partícula es proporcional al cuadrado de la amplitud y de la frecuencia:

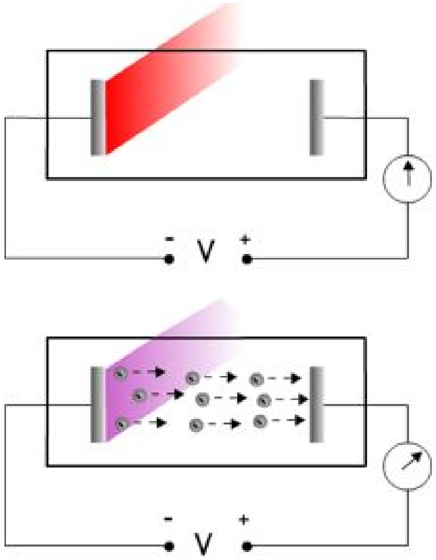
$$E = \left(2\pi^2 m\right)\upsilon^2 A^2$$

- La intensidad de una onda es proporcional al cuadrado de su amplitud, y se define como la energía que atraviesa la unidad de superficie colocada perpendicularmente a la dirección de propagación por unidad de tiempo. ***La energía transportada por una onda aumenta, por tanto, al hacerlo su intensidad (o su amplitud).***

***En consecuencia, el efecto fotoeléctrico debería de producirse más fácilmente con luz más intensa.***

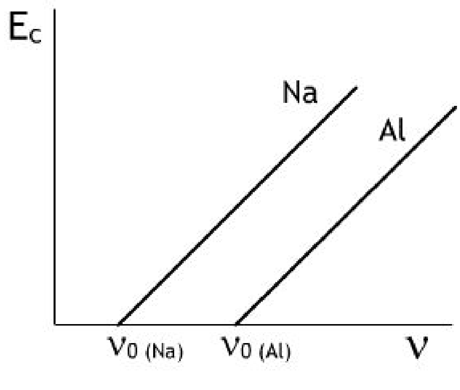
Los hechos experimentales, sin embargo, aportaban los datos siguientes:

- ***Para cada metal existe una frecuencia de la luz (frecuencia umbral) por debajo de la cual, por muy intensa que esta sea, no se produce emisión.***
- ***Si el efecto se produce, la intensidad de la corriente eléctrica producida es proporcional a la intensidad de la luz que ilumina el metal.***
- ***La velocidad de los electrones no depende de la intensidad de la luz, sino de su frecuencia.***




**Dispositivo experimental para el estudio del efecto fotoeléctrico**

Uno de los electrodos metálicos (sometidos a una diferencia de potencial V) es iluminado. Si la luz tiene un frecuencia baja (luz roja) no se produce la emisión de electrones, aunque se aumente la intensidad. Si la luz es de frecuencia alta (violeta) se emiten electrones que se dirigen al polo positivo. Si se aumenta la intensidad, aumenta el número de electrones. El amperímetro detecta la intensidad de la corriente de fotoelectrones.




**Energía cinética de los fotoelectrones**

No se emiten electrones por debajo de una frecuencia umbral, característica para cada metal.

Por encima de la frecuencia umbral la energía cinética es función lineal de la frecuencia.

La pendiente de la recta es idéntica para todos los metales.

En 1905 ***A. Einstein*** propuso una explicación convincente para los hechos expuestos.

***Einstein sugirió que la luz está formada por pequeños cuantos de energía (bautizados por Lewis en 1926 con el nombre de fotones). La energía de los cuantos luminosos está ligada con su frecuencia según la fórmula de Planck:***

$$\boxed{E = h\,\upsilon}$$

Lo que hace Einstein es considerar que la luz no sólo intercambia energía con los átomos en forma de cuantos, sino que ***la propia luz está formada por minúsculos gránulos de energía***. ***La luz tiene naturaleza corpuscular.***

Mientras Planck afirmaba que ***el intercambio*** de energía entre la luz y la materia se produce de forma discontinua, ***Einstein sugiere que es la propia luz la que está cuantizada.***

El propio Einstein nos aclara la diferencia entre su propuesta y la de Planck:

> *"No es lo mismo decir que la cerveza se vende en botellas de media pinta que decir que consta de unidades indivisibles de media pinta."*

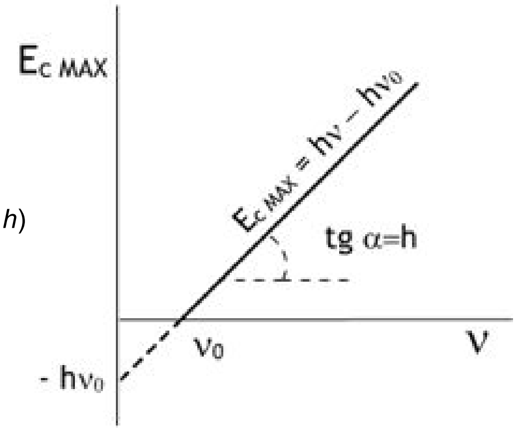
El mecanismo de extracción de los electrones de un metal podemos imaginarlo como una colisión entre los fotones y los propios electrones produciéndose una transferencia de energía entre ambos.

Como en un metal no todos los electrones están ligados con idéntica fuerza, llamaremos ***función trabajo o trabajo de extracción (W) a la energía mínima necesaria para arrancar un electrón de un metal venciendo las fuerza de ligadura***. Si un fotón le comunica su energía el electrón saltará del metal con una energía cinética igual a la diferencia entre la energía absorbida y la empleada en romper las fuerzas de ligadura. El valor máximo de la energía cinética de los electrones vendrá dado por la expresión:

$$E_{c\ MAX} = h\,\upsilon - W$$

Si la frecuencia de la luz incidente se hace cada vez menor los electrones saltarán del metal con menor energía cinética. Cuando la energía cinética máxima de los electrones sea nula no se produce emisión, ya que ni los electrones más débilmente ligados consiguen saltar del metal. Se cumplirá entonces:

$$h\,\upsilon_0 - W = 0\ ;\ \boxed{W = h\,\upsilon_0}\quad \upsilon_0 = \text{frecuencia umbral}$$



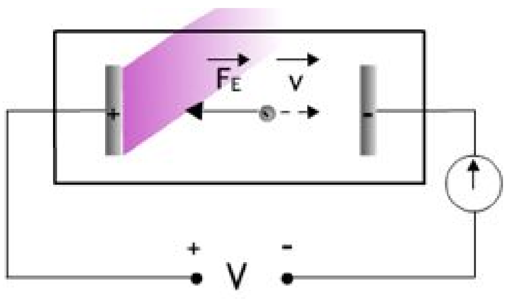

***Por debajo de la frecuencia umbral no existe emisión de fotoelectrones***. Podemos por tanto reescribir la ecuación anterior en la forma:

$$\boxed{E_{c\ MAX} = h\,\upsilon - h\,\upsilon_0}$$

Esta ecuación (una recta de pendiente *h*) se ajusta a los datos experimentales

Experimentalmente se puede determinar la energía cinética máxima de los electrones aplicando una diferencia de potencial que los frene (ver figura). A medida que un electrón avanza hacia el polo negativo es frenado por la fuerza eléctrica y pierde energía cinética que se transforma en potencial eléctrica (Ep = q V). Cuando se detenga toda la energía cinética se habrá transformado en potencial:

$$Ec = Ep = q\,V$$




Cuando hasta los electrones más veloces ($Ec_{MAX}$) sean frenados el amperímetro marcará cero, cumpliéndose entonces:

$$\boxed{E_{c\ MAX} = qV = h\,\upsilon - h\,\upsilon_0}$$

El potencial para el cual se registra una intensidad de corriente nula recibe el nombre de ***potencial de detención o frenado***

**Ejemplo 1**

La longitud de onda umbral para el potasio es 564 nm. Determinar:

a) La función de trabajo para el potasio.
b) El potencial de detención cuando incide sobre el potasio luz de 300 nm de longitud de onda.

DATOS: c = 3 $10^8$ m/s ; e = 1,60. $10^{-19}$ C ; h= 6,63. $10^{-34}$ J . s

**Solución:**

a) La ecuación que describe la emisión de electrones es: $E_c = h\,\upsilon - h\,\upsilon_0$

La función de trabajo (W) es la energía por debajo de la cual no se emiten electrones

$$\left.\begin{array}{l} W = h\,\upsilon_0 \\ c = \lambda_0\,\upsilon_0 \end{array}\right\} W = h\,\frac{c}{\lambda_0} = 6,63\;10^{-34}\,J\,\cancel{s}\,\frac{3\;10^8\,\frac{\cancel{m}}{\cancel{s}}}{564\;10^{-9}\,\cancel{m}} = 3,53.10^{-19}\,J$$

b) El potencial de frenado es aquel que consigue detener a los fotoelectrones (Ec= Ep=q V):

$$V\,e = h\,\upsilon - h\,\upsilon_0$$

$$V = \frac{h\,(\upsilon - \upsilon_0)}{e} = \frac{h\left(\frac{c}{\lambda} - \frac{c}{\lambda_0}\right)}{e} = \frac{h\,c}{e}\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0}\right)$$

$$V = \frac{6,63\;10^{-34}\,J\,\cancel{s}\;3\;10^8\,\frac{\cancel{m}}{\cancel{s}}}{1,60\;10^{-19}C}\left(\frac{1}{300\;10^{-9}} - \frac{1}{564\;10^{-9}}\right)\cancel{m^{-1}} = 1,94\,\frac{J}{C}\,(V)$$

**Ejemplo 2**

Una radiación umbral que permite el funcionamiento de una celula fotoeléctrica posee una longitud de onda de 400 nm.

a) ¿Con qué velocidad saldrán los electrones arrancados de la célula si se ilumina con una radiación de longitud de onda 300 nm?
b) Responde a la pregunta anterior si la célula se ilumina con luz de longitud de onda 500 nm

DATOS: c = 3 $10^8$ m/s ; $m_e$ = 9,110 $10^{-31}$ kg ; h= 6,626. $10^{-34}$ J . s

**Solución:**

a) La frecuencia umbral es aquella por debajo de la cual no hay emisión de fotoelectrones. Como frecuencia y longitud de onda son inversamente proporcionales, para que exista emisión la célula deberá de iluminarse con luz de longitud de onda ***por debajo*** de la umbral:

$$\left.\begin{array}{l} c = \lambda\,\upsilon\,; \\ \upsilon = \frac{c}{\lambda} \end{array}\right\} \upsilon_0 = \frac{c}{\lambda_0} = \frac{3\;10^8\,\frac{\cancel{m}}{s}}{400\;10^{-9}\,\cancel{m}} = 7,5\;10^{14}\,s^{-1}(Hz)$$

$$\upsilon = \frac{c}{\lambda} = \frac{3\;10^8\,\frac{\cancel{m}}{s}}{300\;10^{-9}\,\cancel{m}} = 10^{15}\,s^{-1}(Hz)$$

$$Ec = h\upsilon - h\upsilon_0 = h\,(\upsilon - \upsilon_0) = 6,626.10^{-34}\,J\,\cancel{s}\,(10^{15} - 7,5\;10^{14})\,\cancel{s^{-1}} = 1,66\;10^{-19}\,J$$

$$Ec = \frac{1}{2}\,m\,v^2;\; v = \sqrt{\frac{2\,Ec}{m}} = \sqrt{\frac{2\,.\,1,66\;10^{-19}\,J}{9,11\,10^{-31}kg}} = 603\;684,3\,\frac{m}{s} = 6,04\;10^5\,\frac{m}{s}$$

b) La longitud de onda ***está ahora por encima de la umbral***. La frecuencia correspondiente estará por debajo de la umbral, por lo que no se produce la emisión de electrones:

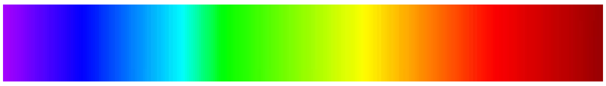
$$\upsilon = \frac{c}{\lambda} = \frac{3\;10^8\,\frac{\cancel{m}}{s}}{500\;10^{-9}\,\cancel{m}} = 6,0\;10^{14}\,s^{-1}(Hz)$$

## Espectro de emisión de los gases

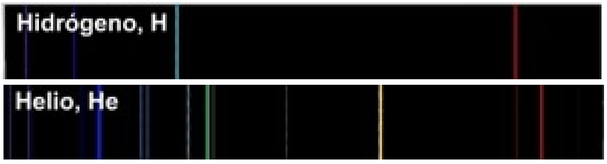
Si encerramos en un tubo hidrógeno o helio y sometemos el gas a voltajes elevados, el gas emite luz. Si hacemos pasar esa luz a través de un prisma los colores que la constituyen se separan dándonos el espectro de la luz analizada.

Pronto se concluyó que la emisión de luz podría deberse a que los electrones absorbían energía de la corriente eléctrica y saltaban a órbitas superiores para, a continuación, volver a caer a las órbitas más próximas al núcleo emitiendo el exceso de energía en forma de energía luminosa.

Esta interpretación conducía, sin embargo, a afirmar que los espectros deberían de ser continuos, ya que al existir órbitas de cualquier radio (y energía) todos los saltos eran posibles. La experiencia, por el contrario, mostraba que los espectros de los átomos son discontinuos. Constan de rayas de diversos colores sobre un fondo negro (ver imagen).



Espectro continuo. Se observan todos los colores que el ojo puede percibir.




Espectros de emisión de H (arriba) y del He (abajo). No son continuos. Constan de rayas de diversos colores separadas por amplias zonas negras en las que no se observa luz.

Con el fin de resolver los problemas acumulados sobre el modelo de átomo planetario, y para explicar el espectro del átomo de hidrógeno, Niels Bohr propone en 1913 un nuevo modelo atómico sustentado en tres postulados:

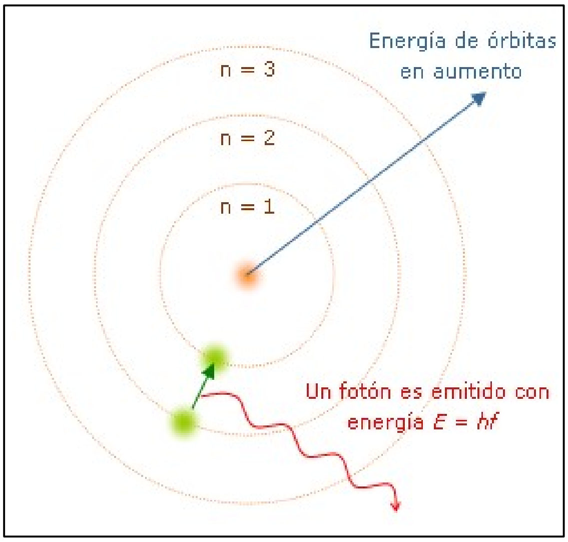
Niels Bohr (1885-1962)

1. Cualquiera que sea la órbita descrita por un electrón, éste n***o emite energía***. Las órbitas son consideradas como ***estados estacionarios de energía.*** A cada una de ellas le corresponde una energía, tanto mayor, cuanto más alejada se encuentre del núcleo.

2. ***No todas las órbitas son posibles***. Sólo pueden existir aquellas órbitas que tengan ciertos valores de energía, dados por el número cuántico principal, n. Solamente son posibles las órbitas para las cuales el número cuántico principal (n) toma valores enteros: n = 1, 2, 3, 4…. Las órbitas que se correspondan con valores no enteros del número cuántico principal, no existen.

3. ***La energía liberada al caer un electrón desde una órbita superior, de energía E2, a otra inferior, de energía E1, se emite en forma de luz***. La frecuencia de la luz viene dada por la expresión:

$$\boxed{E_2 - E_1 = h\,\upsilon}$$




Modelo atómico de Bohr (1913)
Fuente: Wikimedia Commons

Los cálculos basados en los postulados de Bohr daban excelentes resultados a la hora de interpretar el espectro del átomo de hidrógeno, pero hay que tener en cuenta que contradecían algunas de las leyes más asentadas de la Física:

- ***El primer postulado va en contra de la teoría electromagnética de Maxwell***, ya que según esta teoría cualquier carga eléctrica acelerada debería de emitir energía en forma de radiación electromagnética.
- El segundo postulado es aún más sorprendente. ***En la física clásica era inaceptable suponer que el electrón no pudiera orbitar a determinadas distancias del núcleo, o que no pudiera tener determinados valores de energía***. La afirmación era equivalente a suponer que un objeto que describe circunferencias atado a una cuerda, no puede describir aquellas cuyo radio no sea múltiplo de dos (por ejemplo).
- ***El tercer postulado afirma que la luz se emite en forma de pequeños paquetes o cuantos***, en consonancia con la teoría cuántica de Planck.

***El átomo de Bohr era un síntoma más de que la física clásica, que tanto éxito había tenido en la explicación del mundo macroscópico, no servía para describir el mundo de lo muy pequeño, el dominio de los átomos.***

Posteriormente, en la década de 1920, una nueva generación de físicos (Schrödinger, Heisenberg, Dirac…) elaborarán una nueva física, la Física Cuántica, destinada a la descripción de los átomos, que supuso una ruptura con la física existente hasta entonces.

**Resumen**

Los tres fenómenos que propiciaron la formulación de la Física Cuántica fueron:

- ✓ El espectro de emisión del cuerpo negro.
- ✓ El efecto fotoeléctrico.
- ✓ Los espectros de los gases.

La explicación de los tres implicaba la aceptación de que la energía se absorbe y emite no de forma continua, sino en forma de pequeños paquetes o "cuantos" de energía. El valor del cuanto de energía es variable, depende de la frecuencia de la radiación ($E = h\,f$).

Einstein propone en la explicación del efecto fotoeléctrico que la naturaleza discontinua afecta no sólo al proceso de emisión/absorción de la radiación electromagnética por la materia, sino a la propia radiación electromagnética. La luz tiene naturaleza corpuscular, está formada por pequeños cuantos o paquetes de energía que más tarde recibirían el nombre de ***fotones***.

La naturaleza de la luz es dual. Es a la vez onda y partícula. Ambas concepciones no son excluyentes.

Estudiando la distribución de líneas del espectro visible del hidrógeno **Balmer** en 1885 había deducido, de forma empírica, que la posición de las líneas respondía a la siguiente fórmula matemática:

$$\boxed{f = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right); R = 3{,}29.10^{15}\,s^{-1}; n = 3{,}4...}$$

Ampliación

La ley de Coulomb nos permite calcular la fuerza con la que un electrón (de carga e) es atraído por el núcleo de carga Ze (el número de protones, o cargas positivas del núcleo, viene dado por el número atómico, Z):

$$F = k\,\frac{(Ze)\,e}{r^2} = k\,\frac{Ze^2}{r^2} \quad (Z = 1 \text{ para el átomo de H})$$

Imponiendo la condición para que el electrón describa una circunferencia obtenemos:

$$F_N = m\,a_N$$

$$k\,\frac{Ze^2}{r^2} = m\,\frac{v^2}{r}$$

$$k\,Ze^2 = m\,v^2 r$$

Teniendo en cuenta el segundo postulado de Bohr, tenemos:

$$m^2\,v^2\,r^2 = n^2\,\frac{h^2}{4\pi^2};\quad m\,v^2\,r = n^2\,\frac{h^2}{4\pi^2 m\,r}$$

$$k\,Z\,e^2 = n^2\,\frac{h^2}{4\pi^2 m\,r};\quad \boxed{r = \left(\frac{h^2}{4\pi^2 m k\,Z\,e^2}\right) n^2;\ n = 1{,}2{,}3...}$$

Esta expresión permite calcular el radio de las **órbitas permitidas**. Como se puede observar ***existe una condición de cuantización,*** impuesta por los valores permitidos de ***n*** (número cuántico). De esta manera son posibles las órbitas para las cuales ***n*** tenga valores enteros, mientras que no existen aquellas órbitas para las cuales ***n*** no sea entero.

La frecuencia de las líneas que aparecen en el espectro puede ser calculada ahora si tenemos en cuenta la cuantización de las órbitas:

La energía de un electrón que orbita alrededor de un núcleo, con carga Ze, viene dada por:

$$E = Ec + Ep = -\frac{1}{2}\,k\,\frac{Z\,e^2}{r}$$

Introduciendo el valor del radio obtenido para las órbitas posibles obtenemos:

$$E = Ec + Ep = -\frac{1}{2}\,k\,\frac{Z\,e^2}{r} = -\frac{1}{2}\,k\,\frac{Z\,e^2}{\left(\dfrac{h^2}{4\pi^2 mkZe^2}\right)n^2} = -\left(\frac{2\pi^2 mk^2Z^2e^4}{h^2}\right)\frac{1}{n^2}$$

Sustituyendo el valor obtenido para la energía en la expresión que da la frecuencia de la luz emitida (tercer postulado) tenemos:

$$h\,f = E_2 - E_1 = \left(\frac{2\pi^2 mk^2Z^2e^4}{h^2}\right)\left(\frac{1}{n_1^{\,2}} - \frac{1}{n_2^{\,2}}\right) \qquad \boxed{f = \left(\frac{2\pi^2 mk^2Z^2e^4}{h^3}\right)\left(\frac{1}{n_1^{\,2}} - \frac{1}{n_2^{\,2}}\right)}$$

Considerando que $n_1$ = 2 para el espectro visible del átomo de hidrógeno (lo que equivale a decir que la luz visible del espectro del hidrógeno se emite cuando los electrones caen desde órbitas superiores a la segunda orbita), tenemos que las frecuencias observadas deberían responder a la expresión:

$$\boxed{f = \left(\frac{2\pi^2 mk^2Z^2e^4}{h^3}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)}$$

La expresión obtenida concuerda con la obtenida experimentalmente por Balmer (ver más arriba) haciendo:

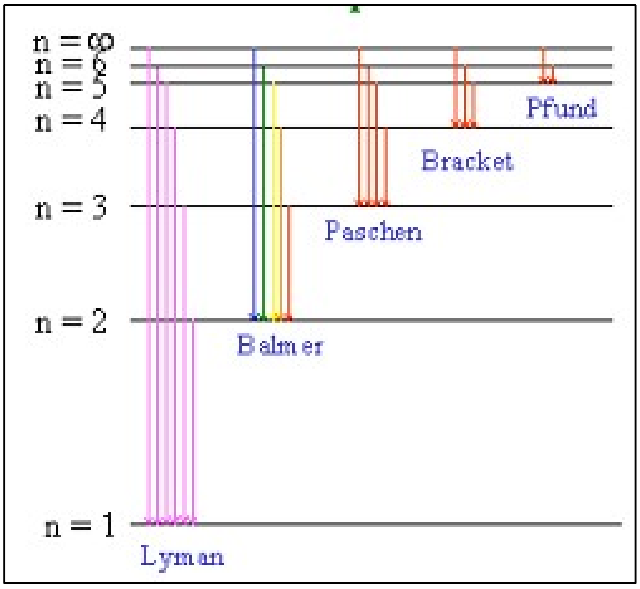
$$R = \frac{2\pi^2 mk^2Z^2e^4}{h^3}$$

En espectroscopía se utiliza una fórmula similar a la mostrada más arriba, conocida con el nombre de ***fórmula de Rydberg.*** La única diferencia es que se calcula el inverso de la longitud de onda o número de onda.

$$\boxed{\vartheta\text{‰} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)}$$

La constante $R_H$ para el átomo de hidrógeno, llamada ***constante de Rydberg***, vale: $1{,}0967757\ 10^7\ m^{-1}$

Con esta fórmula se pueden calcular las distintas líneas para el espectro del átomo de hidrógeno que se pueden clasificar en distintas series.



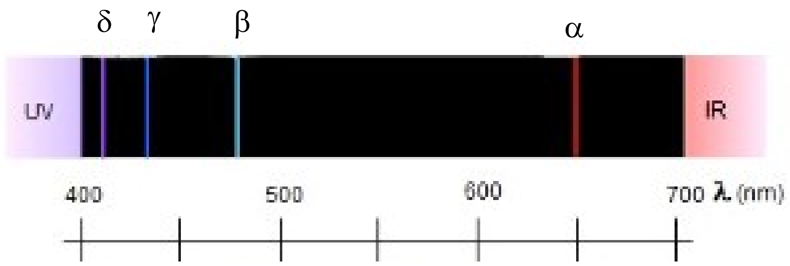

***Serie de Lyman.*** Constituida por las líneas que aparecen cuando los electrones caen desde órbitas superiores ***a la primera órbita*** ($n_1 = 1$; $n_2 = 2, 3, 4…$). Las líneas de esta serie se sitúan en el ***ultravioleta.***

***Serie de Balmer.*** Formada por el conjunto de líneas obtenidas cuando los electrones caen desde órbitas superiores a **la segunda órbita** ($n_1 = 2$; $n_2 = 3, 4, 5…$). Las líneas de esta serie se sitúan en el ***visible.***

***Serie de Paschen.*** Integrada por el conjunto de líneas obtenidas cuando los electrones caen desde órbitas superiores a **la tercera órbita** ($n_1 = 3$; $n_2 = 4, 5, 6…$). Las líneas de esta serie se sitúan en el ***infrarrojo***

También existen las ***series de Brackett y Pfund,*** situadas también ***en el infrarrojo*** y formadas por el conjunto de líneas que se obtienen al caer a ***la cuarta órbita*** ($n_1=4$) ***y a la quinta órbita*** ($n_1=5$), ***respectivamente.***

Se calculan a continuación las longitudes de las líneas correspondientes a la serie de Balmer para el hidrógeno.




| **Línea** | **Long. onda (nm)** |
|---|---|
| $H_\alpha$ | 656,3 (rojo) |
| $H_\beta$ | 486,1 (azul-verde) |
| $H_\gamma$ | 434,1 (violeta) |
| $H_\delta$ | 410,3 (violeta) |

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

$$\frac{1}{\lambda_\alpha} = 1{,}0968.10^7\ m^{-1}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right) = 0{,}15233.10^7\ m^{-1}\ ;\ \lambda_\alpha = 6{,}5647.10^{-7}\, m = 656{,}5\ nm$$

$$\frac{1}{\lambda_\beta} = 1{,}0968.10^7\ m^{-1}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2}\right) = 0{,}20565.10^7\ m^{-1}\ ;\ \lambda_\beta = 4{,}8626.10^{-7}\, m = 486{,}3\ nm$$

$$\frac{1}{\lambda\gamma} = 1{,}0968.10^7\ m^{-1}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2}\right) = 0{,}23033.10^7\ m^{-1}\ ;\ \lambda_\gamma = 4{,}3416.10^{-7}\, m = 434{,}2\ nm$$

$$\frac{1}{\lambda_\delta} = 1{,}0968.10^7\ m^{-1}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{6^2}\right) = 0{,}24373.10^7\ m^{-1}\ ;\ \lambda_\delta = 4{,}1029.10^{-7}\, m = 410{,}3\ nm$$

Como se puede observar la concordancia con las medidas experimentales (tabla) es muy buena.

## Naturaleza de la luz.

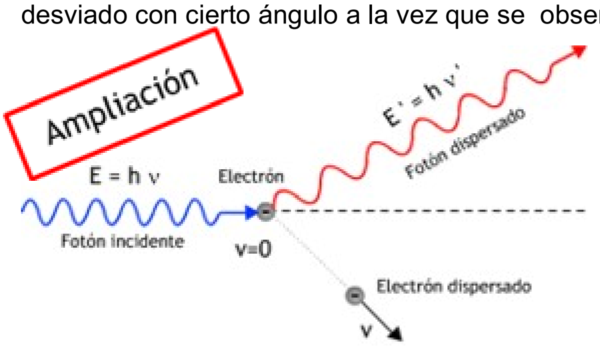
La explicación dada por A. Einstein al efecto fotoeléctrico (1905) reavivó la vieja polémica sobre la naturaleza de la luz.

Einstein consideraba que la luz estaba formada por pequeños cuantos de energía (fotones), sin embargo la teoría electromagnética de Maxwell (1860) otorgaba a la luz una naturaleza ondulatoria apoyada por hechos tales como el fenómeno de la interferencia, la difracción o el valor de la velocidad de la luz en el agua (Fizeau, 1849).

Einstein recupera la vieja idea de Newton de que ***la mejor manera de entender la naturaleza de la luz podría consistir en una fusión de las teorías ondulatoria y corpuscular.***

La idea de que la luz estaba formada por cuantos recibió un fuerte apoyo cuando ***Compton*** en 1923 explicó el fenómeno de la dispersión de rayos X por electrones.

Cuando los rayos X chocan con un electrón se observa que el electrón gana energía y momento saliendo desviado con cierto ángulo a la vez que se observa la emisión de radiación de menor frecuencia.




El llamado ***efecto Compton*** puede explicarse como una colisión de una partícula con masa en reposo nula (fotón) con el electrón. Combinando la TER con la hipótesis de Planck se deduce que tanto la energía del fotón como su momento dependen de la frecuencia.

$$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2 \; ; \; E = p\,c$$

$$\text{Como: } E = h\,\upsilon \Rightarrow p\,c = h\,\upsilon \; ; \; p = \frac{h\,\upsilon}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

El fotón incidente intercambia energía y momento con el electrón que sale desviado. La pérdida de energía del fotón se traduce en una pérdida de frecuencia. De ahí que la radiación dispersada sea de longitud de onda mayor que la incidente. La explicación del efecto Compton combina en su explicación la consideración de la luz como onda y como partícula.

Podemos considerar que el efecto Compton sucede en dos etapas:

- El electrón absorbe un fotón.
- El electrón emite un nuevo fotón de menor frecuencia, adquiriendo energía.

Esto equivale a que el electrón absorbe un fotón de energía: $E_{abs} = h\,\upsilon - h\,\upsilon' = h\,(\upsilon - \upsilon')$

***Por tanto podemos considerar que en la interacción se produce el intercambio de un fotón***. Esta idea se extendió a la interacción entre partículas cargadas. Cuando dos de éstas interaccionan intercambian fotones, así que:

> ***Las interacciones electromagnéticas se pueden considerar como el resultado de un intercambio de fotones entre partículas cargadas.***

**Ejemplo 1** Un fotón tiene una longitud de onda en el vacío asociada de 500 nm. Si se duplica su energía, ¿cuál es la nueva longitud de onda asociada en el vacío?

**Solución:**

Según Planck la energía de los fotones depende de su frecuencia (o longitud de onda):

$$\left.\begin{aligned} E_1 &= h\,\upsilon_1 \\ E_2 &= h\,\upsilon_2 \end{aligned}\right\} \frac{E_1}{E_2} = \frac{E_1}{2\,E_1} = \frac{\upsilon_1}{\upsilon_2}$$

$$\upsilon_2 = 2\,\upsilon_1 \quad \text{Como: } c = \lambda\,\upsilon \Rightarrow \boxed{\lambda_2 = \frac{\lambda_1}{2}} \quad \lambda_2 = 250\text{ nm}$$

## Dualidad onda - partícula

**Louis de Broglie**
(1892 -. 1987)
P. Nobel Física 1929

***Louis de Broglie*** (entre los años 1923-1925) propuso extender la dualidad onda-partícula a toda la materia, desarrollando la teoría matemática que describe las llamada ***ondas de materia:***

***Toda partícula en movimiento lleva asociada una onda, tal que su longitud de onda viene dada por:***

$$\boxed{p\,\lambda = h\;;\; m\,v = \frac{h}{\lambda}}$$

***La materia tiene, por tanto, naturaleza dual.*** Puede comportarse como onda o como partícula. El aspecto ondulatorio queda prácticamente anulado cuando consideramos objetos macroscópicos, grandes, a escala humana, pero cuando consideramos partículas de tamaño subatómico, como electrones, por ejemplo, la dualidad entre onda y partícula es patente.

Los electrones se comportan como una partícula cuando consideramos su movimiento en el seno de un campo magnético, por ejemplo, pero si hacemos incidir un haz de electrones sobre un cristal los espacios existentes entre los iones hacen las veces de minúsculas rendijas de tamaño comparable a la longitud de onda de los electrones y obtenemos un diagrama de difracción análogo al que se obtenía al difractar la luz mediante una rendija estrecha. Esta experiencia, propuesta por el propio de Broglie como posible comprobación de su teoría, fue realizada por ***Davisson y Germer*** en 1927.

**Ejemplo 2**

Un electrón tiene una velocidad v (no relativista) y su onda asociada tiene una longitud de onda de 0,10 nm. Si la velocidad del electrón se duplica, ¿cuánto valdrá la longitud de onda asociada?

**Solución:**

Aplicando la ecuación de de Broglie tenemos:

$$\left.\begin{aligned} m_e\;v_1 &= \frac{h}{\lambda_1} \\ m_e\;v_2 &= \frac{h}{\lambda_2} \end{aligned}\right\} \frac{v_1}{v_2} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}$$

$$\lambda_2 = \lambda_1 \frac{v_1}{v_2} = \lambda_1 \frac{\cancel{v_1}}{2\,\cancel{v_1}} = \frac{\lambda_1}{2} = \frac{0,10\text{ nm}}{2} = 0,05\text{ nm}$$

**Ejemplo 3**

Un electrón se pone en movimiento por la acción de un potencial de 750 V. Determinar:

a) La velocidad que adquire.
b) La longitud de onda asociada al mismo.

DATOS: c = 3 $10^8$ m/s ; $m_e$ = 9,110 $10^{-31}$ kg ; e = 1,60. $10^{-19}$ C; h= 6,626. $10^{-34}$ J . s

**Solución:**

a) Un electrón situado en un campo eléctrico corre espontáneamente hacia los potenciales positivos, por lo que disminuye su energía potencial (Ep = V. q). La energía potencial perdida se transforma en cinética:

$$V\,q = \frac{1}{2}\,m\,v^2\;;\; v = \sqrt{\frac{2\,V\,q}{m}} = \sqrt{\frac{2\,.750\,\frac{J}{\cancel{C}}\,1,60\;10^{-19}\,\cancel{C}}{9,11\,10^{-31}kg}} = 2,20\;10^7\,\frac{m}{s}$$

b) Usando la ecuación de De Broglie:

$$m\,v = \frac{h}{\lambda}\;;\;\lambda = \frac{h}{m\,v} = \frac{6,63\;10^{-34}\,J\,s}{9,11\,10^{-31}\;kg\;2,20\;10^7\,\frac{m}{s}} = 3,31\,10^{-11}m = 0,0331\,nm$$

**Ejemplo 4**

Un fotón posee una longitud de onda igual a 500 nm. Calcula:

a) Su cantidad de movimiento.
b) Su energía.

DATOS: c = 3 $10^8$ m/s ; h= 6,626. $10^{-34}$ J . s

**Solución:**

a) El momento lineal, o cantidad de movimiento, de una partícula está relacionada con su longitud de onda a través de la ecuación de de Broglie:

$$p = m\,v = \frac{h}{\lambda} = \frac{6,625\ 10^{-34}\,J\,s}{500\ 10^{-9}\,m} = 1,325\ 10^{-27}\ kg\frac{m}{s}$$

b) Le energía del fotón podemos calcularla a partir de la fórmula de Planck:

$$E = h\,\upsilon = h\,\frac{c}{\lambda} = 6,625\ 10^{-34}\,J\,\cancel{s}\ \frac{3\ 10^{8}\,\frac{\cancel{m}}{\cancel{s}}}{500\ 10^{-9}\,\cancel{m}} = 3,975\ 10^{-19}\,J$$

Podemos llegar a idéntico resultado a partir de la ecuación que da la energía de una partícula de masa m en la TER si consideramos que el fotón tiene masa nula:

$$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2\ ;\ E = p\,c = 1,325\ 10^{-27}\ kg\frac{m}{s}.3\ 10^{8}\,\frac{m}{s} = 3,975\ 10^{-19}\,J$$

**Ejemplo 5**

Admitiendo que el protón tiene una masa en reposo que es, aproximadamente, 1 836 veces la del electrón, ¿qué relación existirá entre las longitudes de onda de de Broglie de las dos partículas suponiendo que se mueven con la misma energía cinética y considerando despreciables los efectos relativistas?

DATOS: c = 3 $10^8$ m/s ; h= 6,626. $10^{-34}$ J . s

**Solución:**

Sabiendo que la energía cinética de ambas partículas es idéntica podemos establecer la relación entre las velocidades con que se mueven:

$$\left.\begin{aligned} Ec_e &= \frac{1}{2}m_e\,v_e^2 \\ Ec_p &= \frac{1}{2}m_p\,v_p^2 \end{aligned}\right\} Ec_e = Ec_p\ ;\ \frac{1}{2}m_e\,v_e^2 = \frac{1}{2}m_p\,v_p^2\ ;\ m_e\,v_e^2 = m_p\,v_p^2$$

$$\frac{v_e^2}{v_p^2} = \frac{m_p}{m_e} = \frac{1\,836\ \cancel{m_e}}{\cancel{m_e}} = 1\,836$$

$$v_e = \sqrt{1\,836}\ v_p$$

Aplicando la ecuación de de Broglie podemos establecer una relación entre las longitudes de onda y las velocidades:

$$\left.\begin{aligned} m_e\,v_e &= \frac{h}{\lambda_e} \\ m_p\,v_p &= \frac{h}{\lambda_p} \end{aligned}\right\} \frac{m_e\,v_e}{m_p\,v_p} = \frac{\lambda_p}{\lambda_e}$$

$$\frac{\cancel{m_e}\ \sqrt{1\,836}\ \cancel{v_p}}{1836\ \cancel{m_e}\ \cancel{v_p}} = \frac{\lambda_p}{\lambda_e}\ ;\ \frac{\lambda_p}{\lambda_e} = \frac{\sqrt{1\,836}}{1\,836} = 0,0233$$

$$\boxed{\lambda_p = 0,0233\ \lambda_e}$$

## La ecuación de onda del electrón

Erwin Schrödinger
(1887-1961)
P. Nobel Física 1933

***Schrödinger,*** desarrollando la teoría de de Broglie, ***considera al electrón como una onda e intenta obtener la correspondiente ecuación.***

En 1925 propone la llamada ***ecuación de onda para un electrón*** que describe su comportamiento en el átomo de hidrógeno.

$$\nabla^2\psi + \frac{8\,\pi^2 m}{h^2}\,(E - V)\,\psi = 0$$

La resolución de la ecuación de onda permite obtener la llamada ***función de onda para el electrón,*** $\psi$ ***, u orbital atómico,*** y su energía, E.

La función de onda lleva asociados unos ***números cuánticos n, l y m*** los cuales han de tener determinados valores para que la solución obtenida sea válida. ***La energía del electrón no puede tomar valores cualesquiera***, sólo los correspondientes a los valores permitidos de los números cuánticos. ***La energía del electrón en el átomo está cuantizada.***

La diferencia del tratamiento efectuado por Schrödinger frente al efectuado por Bohr es que éste debe introducir los números cuánticos "ad hoc" para obtener las rayas que se observaban en los espectros. Sin embargo, en el tratamiento de Schrödinger, los números cuánticos surgen de forma espontánea como consecuencia de las condiciones impuestas a un electrón ligado al núcleo, ***la cuantización de la energía surge de la propia teoría, no se impone.***

El desarrollo de Schrödinger dio lugar a una de las ramas de la Física Cuántica, ***la Mecánica Ondulatoria.***

## Principio de Incertidumbre

Werner Heisenberg
(1901-1976)
P Nobel Física 1932

Werner Heisenberg desarrolló la otra rama de la Física Cuántica, conocida como ***Mecánica de Matrices,*** ya que estos elementos matemáticos (las matrices) constituyen la parte esencial del lenguaje matemático utilizado.

La mecánica de matrices se caracteriza por un formalismo matemático riguroso, sin concesión alguna a imágenes o modelos:

> *"Todas las cualidades del átomo de la física moderna son inferidas, sólo pueden simbolizarse mediante una ecuación en derivadas parciales en un espacio abstracto multidimensional. No se le puede atribuir directamente propiedad material alguna. Así pues, cualquier representación suya que pueda crear nuestra imaginación es intrínsecamente deficiente; la comprensión del mundo atómico de ese modo primario y sensorial... es imposible"*
>
> *W. Heisenberg*

Las conclusiones más sorprendentes que se extraen de la Mecánica de Matrices surgen cuando se analiza el proceso de medida, según la teoría de Heisenberg:

- ***No es posible determinar, en general, con absoluta certidumbre el resultado de una medida. O lo que es lo mismo, sólo es posible determinar la probabilidad de que la medida dé un valor dado.***
- ***El hecho de medir origina una alteración drástica del propio sistema que se mide.***

En 1927 enuncia el llamado ***Principio de Incertidumbre*** o ***Principio de Indeterminación*** surgido como un consecuencia del desarrollo de su teoría.

> ***"Existen ciertos pares de magnitudes físicas (aquellas cuyo producto tenga las mismas dimensiones que la constante de Planck: J.s) que no pueden ser medidas de forma simultánea con total exactitud ya que debe cumplirse que el producto de la indeterminación de las medidas debe ser igual o mayor que*** $h / 4\pi$**"**
>
> La posición y el momento lineal, o la energía y el tiempo son dos ejemplos de estas magnitudes

$$\boxed{\Delta x \,.\, \Delta p \geq \frac{h}{4\,\pi}} \qquad \boxed{\Delta E \,.\, \Delta t \geq \frac{h}{4\,\pi}}$$

$\Delta x = \text{Indeterminación en la posición}$ $\qquad$ $\Delta E = \text{Indeterminación en la energía}$

$\Delta p = \text{Indeterminación en el momento}$ $\qquad$ $\Delta t = \text{Indeterminación en el tiempo}$

En muchas ocasiones $\frac{h}{2\,\pi}$ se nota como $\hbar$ (se lee "hache cruzada"). $\hbar = 1{,}05\ 10^{-34}\ \mathrm{J\ s}$

$$\boxed{\Delta x \,.\, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \qquad \boxed{\Delta E \,.\, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Es importante saber que la imposibilidad de medir ***de forma simultánea y con exactitud*** las magnitudes consideradas, no es debido a la falta de precisión de los aparatos de medida, sino que ***es algo intrínseco a la propia naturaleza. Esta indeterminación, al ser del orden de la constante de Planck, solamente es apreciable en el mundo de lo muy pequeño (partículas elementales) siendo inapreciable en el mundo macroscópico.***

***El Principio de Incertidumbre echa por tierra la vieja imagen del átomo planetario. No nos podemos imaginar al electrón girando alrededor del núcleo siguiendo una trayectoria definida ya que la observación de dicha trayectoria no es posible según dicho principio.***

Si queremos observar al electrón en su órbita algún tipo de luz debería incidir sobre él y, tras ser reflejada, llegar a nuestros ojos (o aparatos de observación) permitiéndonos detectar su posición. Esto que es posible en el mundo macroscópico, no lo es en el mundo subatómico. Debido a la extrema pequeñez del electrón cualquier fotón que chocara contra él modificará su velocidad desviándolo de su trayectoria.

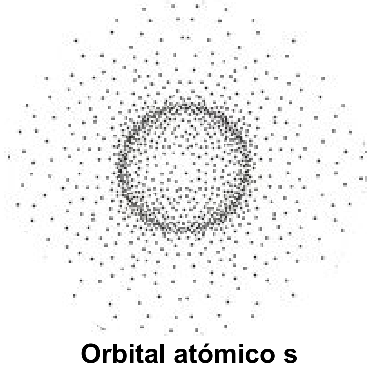
Podemos pensar en usar luz de una frecuencia muy baja con el fin de que la energía de sus fotones sea tan pequeña que la transferencia de energía sea muy pequeña con el fin de alterar muy poco su velocidad. Si es así, la baja incertidumbre cometida en la medida de la velocidad (o el momento) llevará aparejada una gran incertidumbre en la posición, ya que cuanto mas baja es la frecuencia de una luz menor poder de resolución tiene. No veríamos entonces al electrón como una partícula nítida, sino como una especie de mancha borrosa. Sólo podremos afirmar que se encuentra en una zona, tanto más amplia cuando menor sea la frecuencia de la luz utilizada.

Si no podemos observar el electrón en su órbita, y dado que una teoría física sólo debe versar sobre cosas observables y verificables mediante experimentos, ***Heisenberg propone abandonar cualquier imagen del átomo y describir éste de modo puramente matemático.***

***Max Born*** propuso una interpretación que permite la conciliación de la mecánica de Heisenberg y la teoría ondulatoria de Schrödinger. Según Born ***el cuadrado de la función de onda de Schrödinger da la probabilidad de encontrar al electrón en un punto del espacio en un momento dado.***

***No es posible hablar de órbitas definidas, pero sí de regiones del espacio en las que existe una gran probabilidad de encontrar al electrón.***

La mecánica de matrices de Heisenberg y la mecánica ondulatoria de Schrödinger son dos formas equivalentes de la Mecánica Cuántica**.**



**Orbital atómico s**

La máxima probabilidad de encontrar al electrón (puntos) se localiza a una distancia igual al radio de la primera órbita del átomo de Bohr.