

# Tema 08:

## El nacimiento de la mecánica cuántica.



SOLVAY CONFERENCE 1927

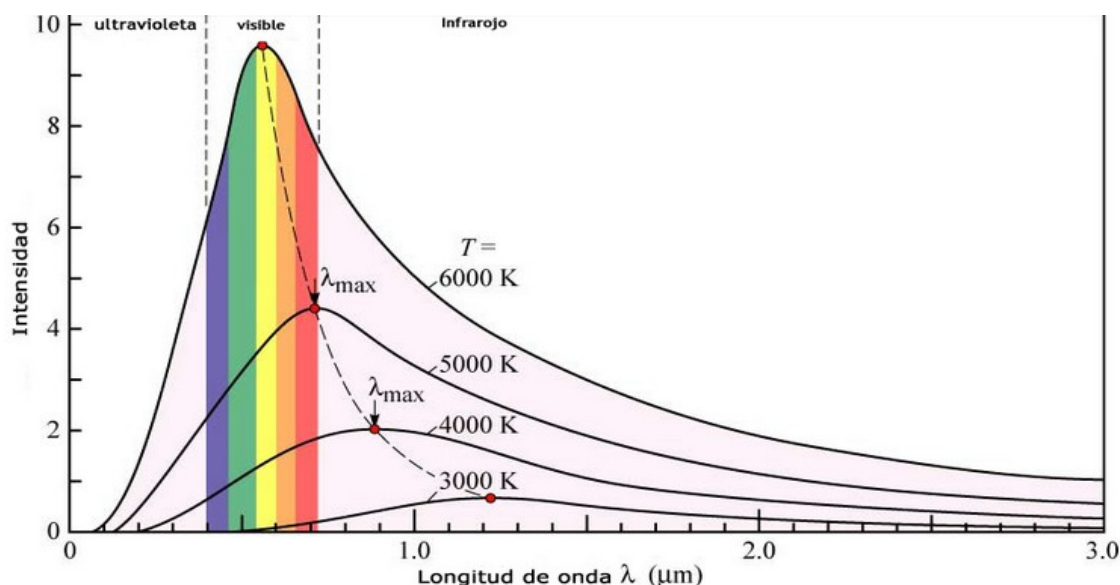
colourized by postincolour.com

A. PICARD   E. HENRIOT   P. EHRENFEST   Ed. HERSEN   Th. DE DONDER   E. SCHRÖDINGER   E. VERSCHAFFELT   W. PAULI   W. HEISENBERG   R.H FOWLER   L. BRILLOUIN  
P. DEBYE   M. KNUDSEN   W.L. BRAGG   H.A. KRAMERS   P.A.M. DIRAC   A.H. COMPTON   L. de BROGLIE   M. BORN   N. BOHR  
I. LANGMUIR   M. PLANCK   Mme CURIE   H.A. LORENTZ   A. EINSTEIN   P. LANGEVIN   Ch.E. GUYE   C.T.R. WILSON   O.W. RICHARDSON  
Absents : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL

## 0801. La radiación del cuerpo negro.

Los cuerpos radian cuando se calientan. La temperatura mide el valor de la energía cinética media de las moléculas. Parte de esa energía cinética es emitida como ondas electromagnéticas. La teoría de Maxwell explica el proceso pues predice que toda carga acelerada (como los electrones) emite ondas electromagnéticas. El medio circundante también está a cierta temperatura y el cuerpo absorberá radiación de fuera.

Si pudiese aislarse totalmente un objeto del exterior, todas sus emisiones quedarían reguladas exclusivamente por su temperatura propia. A un ente tan ideal como inalcanzable se le denomina **cuerpo negro**. Entre sus mejores aproximaciones naturales figuran las estrellas.



Un cuerpo negro irradia abarcando todo el espectro electromagnético, y la contribución energética de cada longitud de onda depende de la temperatura.

Al aumentar la temperatura:

→ Se amplifica la emisión total de energía, representada por el área bajo la curva. El valor de dicha integral había sido deducido empíricamente por dos científicos del siglo XIX, Stefan y Boltzmann, y es proporcional a la cuarta potencia de la temperatura:

$$E = \sigma \cdot T^4$$

donde E es la energía total emitida por unidad de superficie y de tiempo,  $\sigma$  es la constante de Stefan-Boltzmann que vale  $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ . Esta expresión recibe el nombre de **Ley de Stefan-Boltzmann**.

→ La longitud de onda máxima se desplaza hacia longitudes de onda menores. Esto es descrito por la **Ley de Wien**:

$$\lambda_{\text{máx}} \cdot T = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}.$$

La longitud de onda para la que la emisión de energía es máxima es inversamente proporcional a la temperatura.

Max Planck se preguntaba por qué aparecían esas curvas y esas leyes. Primero calculó una fórmula aproximada para esas curvas y se dio cuenta de la presencia reiterada de una constante que denominó "h". Planck era contrario a la Teoría Atómica, pero la única solución que encontró fue considerar los átomos como osciladores armónicos que sólo pueden absorber o emitir energía en cantidades proporcionales a su frecuencia de vibración. Esta energía mínima se llamó "cuanto".

$$E = h f$$

Es la ecuación de Planck. "h" es una constante universal llamada constante de Planck =  $6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ . Esta hipótesis supone que la energía se emite o absorbe en "paquetes" de valor hf, 2hf, 3hf, ... Ello significa que la energía de los osciladores está cuantizada.

Esto refutaba la teoría de Maxwell y a los cuantos de luz se les llamó fotones.

A partir de esto Planck dedujo la relación que existe entre la energía emitida y la frecuencia de la radiación a una temperatura dada:

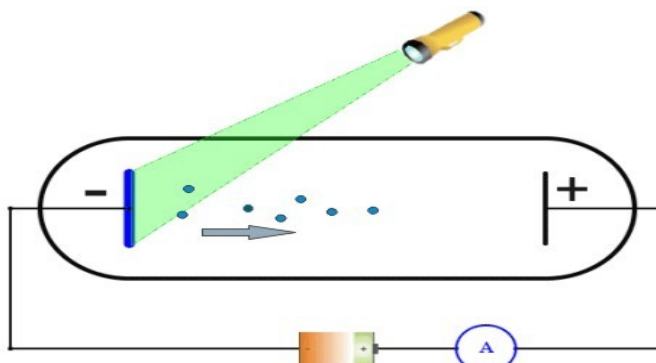
$$E = 8\pi^5 h^3 / 15c^3 \cdot 1/(e^{hf/KT} - 1)$$

Conocida como ecuación de radiación de Planck. K es la constante de Boltzmann =  $1,38 \cdot 10^{-23}$  J/K.

## 0802. Efectos fotoeléctrico y Compton. Los fotones.

### Efecto fotoeléctrico

En 1887 Hertz observó que una lámina de cinc, expuesta a la luz, emitía electrones. Esto podía comprobarse utilizando un electroscopio. A la emisión de electrones por una superficie metálica debido a la acción de una radiación luminosa se le llamó efecto fotoeléctrico. Se repitieron los experimentos con más metales y se observó que los metales, sobre todo los alcalinos y alcalinotérreos, emiten electrones con facilidad al ser iluminados.



Experimentalmente se llegó a las siguientes conclusiones:

- El efecto fotoeléctrico es instantáneo.
- Para cada metal existe una frecuencia mínima de luz incidente por debajo de la cual no se produce la emisión de electrones (**frecuencia umbral**).
- El número de electrones emitidos por unidad de tiempo depende de la intensidad de la luz incidente.
- La energía cinética de los electrones es proporcional a la frecuencia de la luz incidente e independiente de la intensidad de la misma.

La teoría ondulatoria de la luz es incapaz de explicar el efecto fotoeléctrico. Einstein adoptó la hipótesis de Planck y admitió que la energía luminosa está constituida por "cuantos de energía" o fotones. La energía de cada fotón viene dada por:

$$E = h \cdot f$$

Los electrones de un metal gozan de cierta libertad de movimiento que, sin embargo, no les permite abandonar los límites del cristal. Si un electrón capta un fotón suficientemente energético, incrementará su energía de tal forma que podrá vencer las fuerzas que lo retienen unido al metal y salir de él.

Cuando un fotón suficientemente energético choca con un electrón del metal, la energía del fotón se emplea en arrancar al electrón del metal y darle cierta energía cinética:

$$h \cdot f = E_c + W$$

W es el trabajo necesario para extraer el electrón del metal, se llama **trabajo o energía de extracción** y su valor es característico de cada metal.

El efecto fotoeléctrico sólo tiene lugar para frecuencias superiores a la frecuencia umbral ( $f_0$ ), que se corresponde a la energía de extracción.

$$W = h \cdot f_0$$

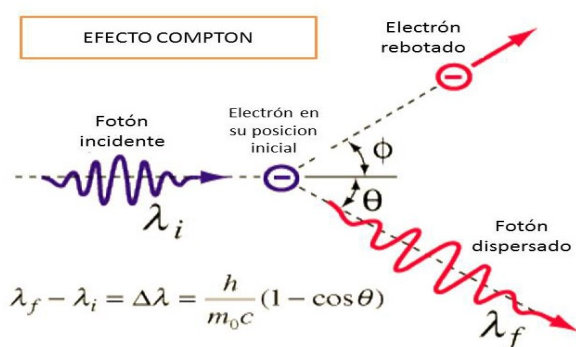
La energía cinética que corresponde a un electrón será:

$$E_c = h(f - f_0)$$

conocida como Ecuación de Einstein del efecto fotoeléctrico.

### Efecto Compton

En 1923 Compton descubrió que un haz de rayos X era dispersado cuando atravesaba una región en la que existían electrones. La peculiaridad del fenómeno estriba en que la frecuencia de la radiación dispersada es menor que la de la radiación incidente.



Experimentalmente obtuvo la siguiente relación:

$$\lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos \alpha)$$

donde  $\lambda_c$  es una constante, de valor  $2,43 \cdot 10^{-12}$  m, a la que se llama longitud de onda Compton para el electrón. El fenómeno es conocido como **efecto Compton**.

Para explicar este fenómeno se consideró la interacción entre fotón y electrón como una colisión perfectamente

elástica entre dos partículas. En estas condiciones deben cumplirse los principios de conservación de la energía y de la cantidad de movimiento, y a partir de ellos puede obtenerse la ecuación anterior.

### Los fotones

El efecto fotoeléctrico y el efecto Compton se interpretan a partir de un modelo corpuscular de las ondas electromagnéticas, considerando la energía radiante concentrada en forma de fotones.

Los fotones tienen una energía y también tiene un momento lineal p:

$$p = m \cdot c = m \cdot c^2 / c = E / c$$

Según la física relativista se cumple para cualquier partícula que:

$$E = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2}$$

Para que las ecuaciones anteriores sean compatibles, la única solución es  $m_0 = 0$ ; es decir los fotones son partículas con masa en reposo cero.

Por tanto un fotón es una partícula de masa en reposo nula, que se mueve a velocidad c y está caracterizada por las magnitudes:

$$E = h \cdot f \quad \text{y} \quad p = h \cdot f / c = h / \lambda.$$

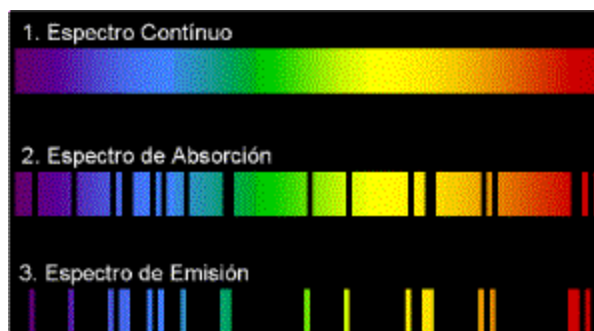
Las ondas electromagnéticas deben tratarse como partículas para explicar los fenómenos anteriores. Sin embargo no puede desecharse la teoría ondulatoria, necesaria para explicar fenómenos como las interferencias y la difracción. Es decir, las ondas electromagnéticas tienen comportamiento corpuscular y ondulatorio, no pueden considerarse ondas ni partículas sino algo nuevo que presenta ambos tipos de propiedades.

Cuando una onda electromagnética interactúa con una partícula cargada eléctricamente, las cantidades de energía y de momento lineal que se intercambian en el proceso son las correspondientes a un fotón.

## 0803. Espectros y modelos atómicos.

Se llama espectro a una representación gráfica de la distribución de la intensidad de la radiación electromagnética, emitida o absorbida por una muestra de una sustancia, en función de la longitud de onda (o de la frecuencia de la radiación).

Los espectroscopios son aparatos que se utilizan para dispersar la luz emitida o transmitida por un cuerpo, de forma que se puedan ver sus diferentes componentes monocromáticas. La imagen obtenida se llama espectro de la luz utilizada.



Para producir la dispersión de la luz se utilizan prismas o redes de difracción (consisten en un gran número de rayas o rendijas igualmente separadas grabadas en una superficie plana).

**Espectros de emisión:** En general, la luz emitida por un objeto no está compuesta como la luz blanca, sino tan sólo por algunas componentes. Al colocar un elemento químico incandescente en un espectroscopio aparecen unas franjas estrechas de luz de distintas frecuencias. El espectro de emisión es característico de cada elemento y se utiliza para distinguirlo de los demás.

**Espectros de absorción:** Cuando la luz blanca atraviesa un objeto, éste absorbe la luz de unas determinadas frecuencias (que coinciden con las emitidas en los espectros de emisión). El espectro que se obtiene es un espectro continuo con algunas rayas negras correspondientes a las frecuencias absorbidas.

El espectro de emisión de una muestra que esté en estado atómico consta de una serie de rayas (espectro discontinuo), que sirven para identificar la muestra.

El más sencillo de todos es el átomo de hidrógeno. En 1885 Johann Balmer descubrió que las longitudes de onda de la zona visible del espectro del hidrógeno corresponden a la fórmula:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Donde R es la constante de Rydberg, cuyo valor es  $1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ .

Hoy en día se conocen muchas más líneas y la fórmula a la que responden a debido modificarse, pasando a ser:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Según los distintos valores de  $n_1$  se obtienen las llamadas series de líneas espectrales:  $n_1 = 1$  serie de Lyman;  $n_1 = 2$  serie de Balmer;  $n_1 = 3$  serie de Paschen;  $n_1 = 4$  serie de Brackett y  $n_1 = 5$  serie de Pfund. En todos los casos  $n_2 > n_1$ .

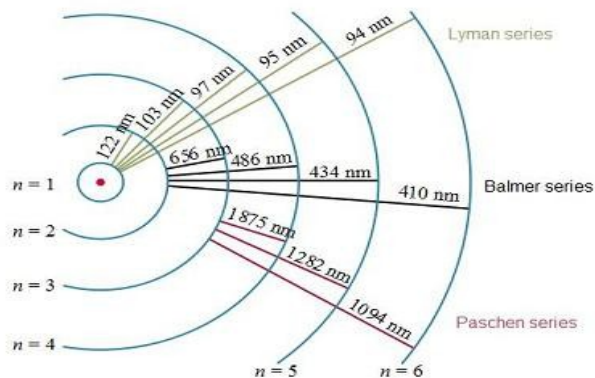
El modelo atómico de Bohr

La explicación de estos espectros no se consiguió hasta que Niels Borh propuso su nuevo modelo atómico basado en tres postulados:

1. Los electrones giran alrededor del núcleo en órbitas circulares estables, sin emitir ni absorber energía radiante.
2. Sólo son posibles aquellas órbitas en las que el momento angular del electrón es un múltiplo entero de la cantidad  $h/2\pi$ .
3. Cuando el electrón pasa de una órbita a otra absorbe o emite energía en forma de fotones, de una energía igual a la diferencia de energía entre ambas órbitas.  $\Delta E = h \cdot f$ .

Los espectros de emisión se producen cuando los electrones previamente excitados vuelven a su estado fundamental emitiendo energía de determinadas frecuencias:  $\Delta E = h \cdot f$ . En los espectros de absorción el mecanismo es el contrario al de los espectros de emisión: los electrones absorben los fotones de unas determinadas frecuencias y pasan a niveles superiores de energía.

A partir de estos postulados puede obtenerse la ecuación de los espectros atómicos, así como el valor de la constante de Rydberg en función de otras constantes conocidas.



## 0804. Las bases de la Mecánica Cuántica.

El modelo de Bohr consiguió explicar el espectro del hidrógeno, pero no el de otros átomos. La teoría de Bohr mezcla elementos clásicos y cuánticos.



En 1926 Erwin Schrödinger formuló la Mecánica Ondulatoria basada en la Ecuación de ondas. El mismo año Werner Heisenberg publicó su Mecánica de Matrices. Pronto se comprobó que ambas teorías son equivalentes. El conjunto fue mejorado por algunos científicos y tomó el nombre de Teoría Cuántica.

La Teoría Cuántica tiene tres pilares fundamentales:

A. **Dualidad onda-partícula. Hipótesis de De Broglie.** En 1924, Luis De Broglie extendió el carácter dual de la luz a las partículas. Consideró que toda partícula en movimiento lleva asociada una onda cuya longitud de onda es:

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

Esta dualidad se ha comprobado experimentalmente al observarse la difracción de electrones.

B. **El Principio de Incertidumbre de Heisenberg.** No es posible determinar simultáneamente, de un modo preciso la posición y la cantidad de movimiento de una partícula.  $\Delta x \cdot \Delta p \geq h/4\pi$

Este principio hace que no pueda hablarse de trayectorias ni de órbitas referidas al electrón.

Es aplicable también a la energía y el tiempo.  $\Delta E \cdot \Delta t \geq h/4\pi$

C. **Ecuación de Schrödinger.** Está basada en la hipótesis de De Broglie y en considerar que el movimiento del electrón es análogo a un sistema de ondas estacionarias.

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

donde  $\Psi$  es la función de onda y representa la amplitud de la onda asociada al electrón.  $|\Psi|^2$  es la densidad de probabilidad e indica la probabilidad de encontrar al electrón en ese punto. Esta ecuación es tan compleja que sólo puede resolverse exactamente para el átomo de hidrógeno.

### Números cuánticos y orbitales atómicos.

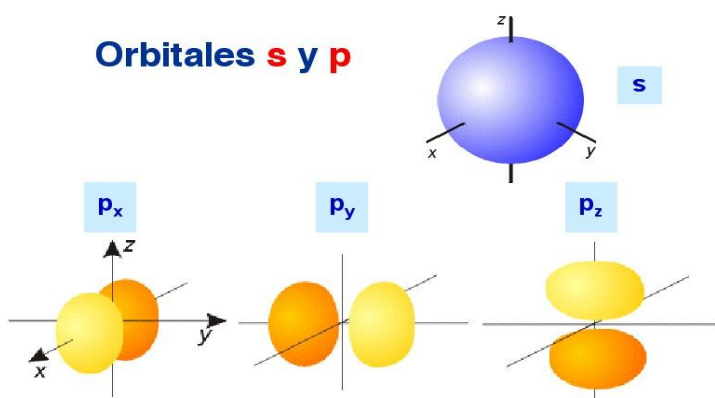
Al resolver la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno aparecen los números cuánticos  $n$  y  $m$ .

$n$  = número cuántico principal  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

$l$  = número cuántico secundario o azimutal  $l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$

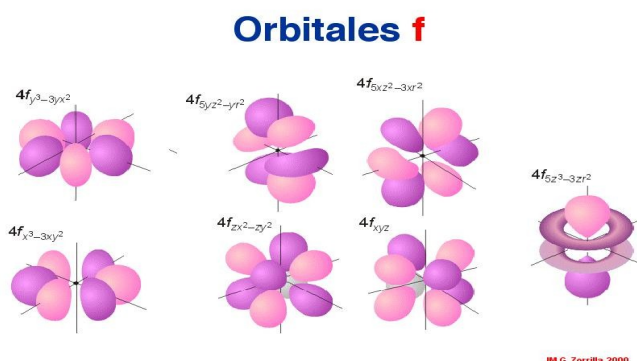
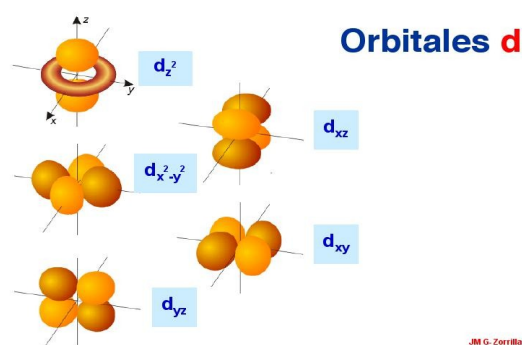
$m$  = número cuántico magnético  $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$

### Orbitales s y p



JM G. Zorrilla 2000

A la función de onda  $\Psi$  que describe el comportamiento del electrón y que depende de los números cuánticos se le llama orbital. También se llama orbital a la zona del espacio donde la probabilidad de encontrar al electrón es muy alta. Los números cuánticos determinan respectivamente la energía, la forma y la orientación de los orbitales. Según su forma los orbitales pueden ser: orbitales s ( $l = 0$ ); orbitales p ( $l = 1$ ); orbitales d ( $l = 2$ ) y orbitales f ( $l = 3$ ).



En un tratamiento posterior Dirac combinó la Mecánica Cuántica con la Teoría de la Relatividad y encontró un cuarto número cuántico: el número cuántico de spin  $s$ , que sólo puede tomar los valores  $+1/2$  y  $-1/2$ . Está relacionado con el momento angular intrínseco del electrón.

El estado de cada electrón dentro de un átomo queda definido mediante los cuatro números cuánticos ( $n$ ,  $l$ ,  $m$  y  $s$ ). Debe tenerse en cuenta que los electrones de un átomo deben cumplir el Principio de Exclusión de Pauli:

“En un átomo multielectrónico nunca podrá existir más de un electrón en el mismo estado cuántico; es decir, los electrones en el átomo no pueden tener iguales sus cuatro números cuánticos.”

Ello limita la capacidad de los orbitales para albergar electrones:

orbital s	-----	2 electrones
orbitales p	-----	6 electrones
orbitales d	-----	10 electrones
orbitales f	-----	14 electrones.

La mecánica cuántica es la más extraña de las disciplinas científicas. Desde la perspectiva de nuestra vida cotidiana, nada tiene sentido en la teoría cuántica, teoría acerca de las leyes de la naturaleza que rigen el dominio de lo muy pequeño (así como de algunos sistemas grandes, como los superconductores). La misma palabra, *quantum*, denota un paquete de energía muy pequeño. En la mecánica cuántica, nombre que se da a la teoría cuántica, se estudian los componentes básicos de la materia, las partículas de las que está hecho todo el universo. Estas partículas son los átomos, moléculas, neutrones, protones, electrones y quarks, así como los fotones, las unidades básicas de la luz. Todos estos objetos (si verdaderamente puede llamárseles así) son mucho más pequeños que cualquier cosa que pueda ver el ojo humano. A este nivel todas las reglas de comportamiento que nos son familiares dejan de cumplirse. La entrada en ese extraño nuevo mundo de lo muy pequeño es una experiencia tan chocante y rara como las aventuras de Alicia en el País de las Maravillas. En ese irreal mundo cuántico las partículas son ondas y las ondas partículas. Un rayo de luz, por lo tanto, es una onda electromagnética que se desplaza a través del espacio y una corriente de partículas minúsculas que se mueven hacia el observador, en el sentido de que ciertos experimentos o fenómenos cuánticos revelan la naturaleza ondulatoria de la luz mientras que otros revelan su naturaleza corpuscular, pero nunca ambas a la vez. Y, sin embargo, antes de observar un rayo de luz, éste es ambas cosas, una onda y una corriente de partículas. En el dominio cuántico todo es borroso: existe un aspecto aleatorio común a todas las entidades con las que tratamos, sean éstas luz o electrones o átomos o quarks. Un *principio de incertidumbre* reina en la mecánica cuántica, donde la mayoría de las cosas no pueden verse, sentirse o conocerse con precisión, sino sólo a través de una neblina de probabilidad y azar. Las predicciones científicas sobre resultados (medidas) son de naturaleza estadística y se dan en

términos de probabilidades; podemos predecir sólo la localización más probable de una partícula, no su posición exacta. Y en ningún caso podemos determinar la posición y el momento de una partícula con gran precisión simultáneamente. Además, la niebla que impregna el mundo cuántico no puede desaparecer jamás. No existen «variables ocultas», que, de conocerse, aumentarían nuestra precisión más allá del límite natural que gobierna el mundo cuántico. Simplemente, la incertidumbre, la borrosidad, la probabilidad, la dispersión no pueden desaparecer; estos misteriosos, ambiguos y velados elementos son parte íntegra de ese mundo de maravillas.

Aún más inexplicable es la misteriosa *superposición* de estados de sistemas cuánticos. Un electrón (partícula elemental cargada negativamente) o un fotón (cuanto de luz) pueden hallarse en una superposición de dos o más estados. Ya no hablamos de «aquí o allí»; en el mundo cuántico se habla de «aquí y allí». En cierto sentido, un fotón, una parte de un flujo de luz que ilumina una pantalla con dos agujeros, puede pasar a través de los dos agujeros a la vez, y no, como cabría esperar, a través de uno u otro. Un electrón en órbita alrededor del núcleo (atómico) se halla potencialmente en muchos sitios a la vez.

Pero el fenómeno más asombroso en el extraño mundo del cuanto es el efecto llamado *entrelazamiento* («entanglement»). Dos partículas que pueden estar muy alejadas entre sí, incluso millones o billones de kilómetros, están misteriosamente ligadas la una con la otra. Cualquier cosa que ocurra a una de ellas causa *inmediatamente* un cambio en la otra.

Tomado de "Entrelazamiento" de Amir D Aczel (2002)