

El desarrollo de la Mecánica Cuántica

- 1900 Radiación de cuerpo negro (Planck).
- 1905 Efecto fotoeléctrico y cuantas de energía (Einstein).
- 1905 Movimiento Browniano y tamaño atómico (Einstein).
- 1907 Calor específico de los sólidos y cuantización de la energía térmica (Einstein).
- 1911 Núcleo atómico (Rutherford).
- 1913 Modelo atómico (Bohr).
- 1916 Emisión estimulada y formación de líneas espectrales (Einstein).
- 1924 Dualidad onda-partícula (de Broglie).
- 1925 Principio de incerteza (Heisenberg).
- 1926 Mecánica ondulatoria (Schrödinger).
- 1928 Spin del electrón (Dirac).

Parte II

Mecánica Cuántica

Índice

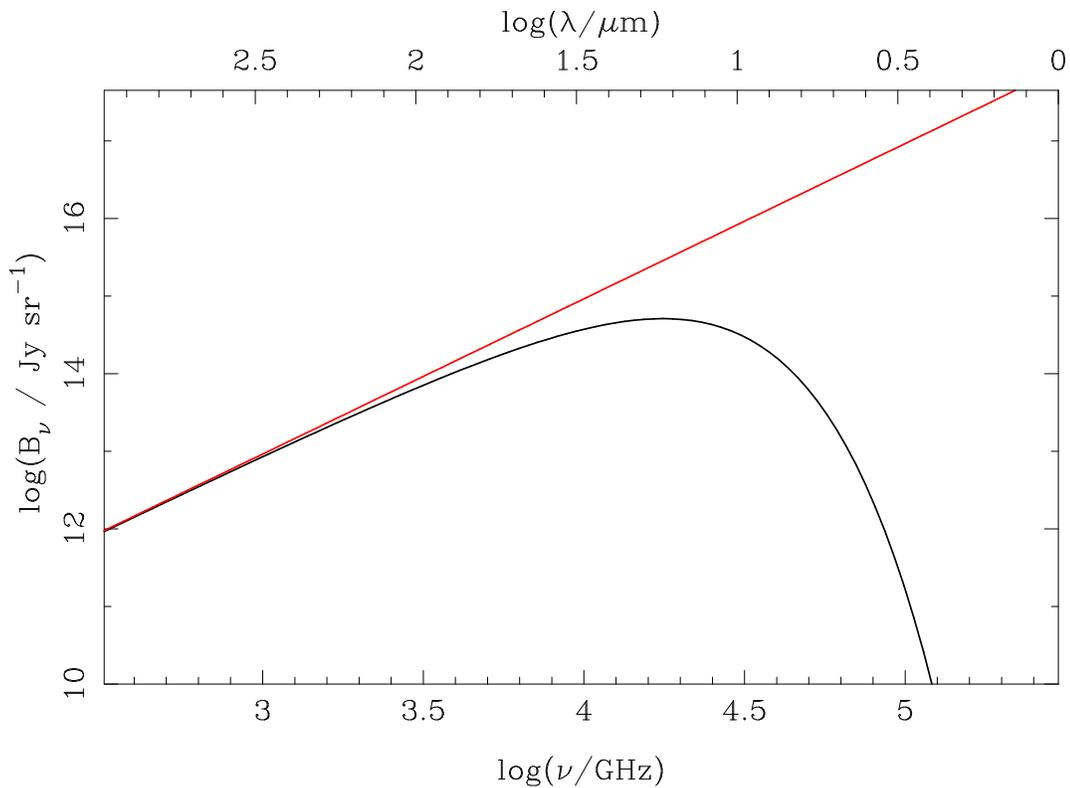
II	Mecánica Cuántica	1
1.	El desarrollo del quantum	2
1.1.	Radiación de cuerpo negro	2
1.2.	Efecto fotoeléctrico	7
1.3.	Movimiento browniano	8
1.4.	Calor específico de los sólidos	9
2.	Teoría atómica	10
2.1.	Radioactividad natural	10
2.2.	Experimento de Rutherford	11
2.3.	Modelo de Bohr	12
2.4.	Coeficientes de Einstein	15
3.	Mecánica ondulatoria	16
3.1.	Dualidad onda-partícula	16
3.2.	Principio de superposición	16
3.3.	Incerteza (x, p) , (t, E)	20
3.4.	Ecuación de Schrödinger	21
3.5.	Soluciones de la ecuación de Schrödinger	21

4. Spin y partículas idénticas	22
4.1. Spin y superposición	22
4.2. Partículas idénticas	23

1. El desarrollo del quantum

1.1. Radiación de cuerpo negro

- ¿Cuál es el espectro de radiación electromagnética de un cuerpo con temperatura T ?
- Caso mas simple posible: un cuerpo que absorbe toda la radiación que le llega, hasta llegar a una temperatura T y re-emitir. A temperatura ambiente, un cuerpo que absorbe perfectamente, sin reflejar, se vería perfectamente negro a longitud de onda visibles.
- Dispositivo experimental: un horno con paredes reflejante (i.e. conductoras).



1.1.1- Densidad de energía electromagnética

Tomando en cuenta todas las fuentes de carga y corrientes, las ecuaciones de Maxwell se escriben:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \frac{\rho_l}{\epsilon_0}, \quad (1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j}_l + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \quad (4)$$

Para medios lineales, $\vec{D} = \epsilon \epsilon_0 \vec{E}$ y $\vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H}$.

.6

Combinamos las ecuaciones de Maxwell Ec. 4 y Ec. 3: $\vec{E} \cdot (\text{Ec. 4}) + \vec{H} \cdot (\text{Ec. 3})$:

$$\vec{E} \cdot \left[\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \vec{H} - \vec{j}_l \right]$$

$$\oplus \vec{H} \cdot \left[\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times \vec{E} \right],$$

$$\vec{E} \cdot \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{H} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{E} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{H}) - \vec{H} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E}) - \vec{E} \cdot \vec{j}_l.$$

Y usamos la relación vectorial

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{E} \times \vec{H}) = (\vec{\nabla} \times \vec{E}) \cdot \vec{H} - (\vec{\nabla} \times \vec{H}) \cdot \vec{E},$$

para llegar a

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} [\vec{E} \cdot \vec{D} + \vec{H} \cdot \vec{B}] = -\vec{\nabla} \cdot (\vec{E} \times \vec{H}) - \vec{E} \cdot \vec{j}_l.$$

.7

Reescribimos la Ec. 7, identificando las densidades de energías eléctricas y magnéticas, $u = \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{D} + \frac{1}{2} \vec{H} \cdot \vec{B}$,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{S} = -\vec{j}_l \cdot \vec{E}, \text{ con } \boxed{\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}} \text{ vector de Poynting.} \quad (5)$$

Veamos que la Ec. 5 es la ecuación de continuidad para la densidad de energía u . El término $\vec{j}_l \cdot \vec{E}$ es la potencia ejercida por \vec{E} , \vec{B} por unidad de volumen: la fuerza de Lorentz ejercida en un volumen dV es

$$d\vec{F} = \rho_l dV (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}),$$

donde $\vec{v}(\vec{r})$ es la velocidad del fluido de cargas libre. La potencia asociada a $d\vec{F}$ es

$$dP = \vec{v} \cdot d\vec{F} = \vec{v} \rho_l dV \cdot \vec{E} \Rightarrow \frac{dP}{dV} = \vec{j}_l \cdot \vec{E}, \text{ ya que } \vec{j}_l = \rho_l \vec{v}.$$

.8

Integrando la Ec. 5 en un volumen \mathcal{V} ,

$$\int d\mathcal{V} \left\{ \frac{\partial u}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{S} = -\vec{j}_i \cdot \vec{E} \right\},$$

$$\underbrace{\int \frac{\partial u}{\partial t} d\mathcal{V}}_{\frac{dU}{dt}, \text{variación de energía EM}} = - \underbrace{\int \vec{S} \cdot d\vec{S}}_{\text{flujo de energía}} - \underbrace{\int \vec{j}_i \cdot \vec{E} d\mathcal{V}}_{\text{potencia disipada en las cargas}}.$$

.9

1.1.1 Ondas electromagnéticas y modos normales.

- Ecuaciones de Maxwell \Rightarrow campos (\vec{E}, \vec{B}) satisfacen ecuación de ondas (**ta-rea**):

$$\nabla^2 \vec{E} - \epsilon\epsilon_0 \mu\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0,$$

$\Rightarrow c = c_0/n$, donde $c_0 = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ es la velocidad de la luz en el vacío, y n es el *índice de refracción*.

- Para una onda plana,

$$u = \epsilon_0 E^2 \text{ y } \vec{S} = u c \hat{k}.$$

.10

1.1.1 Ondas estacionarias

- Separando variables en la Ec. de ondas Ec. 10, para una componente $\psi(\vec{x}, t)$ del campo (\vec{E}, \vec{B}) , $\psi = XYZT$, tenemos

$$\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{\ddot{T}}{T} = 0.$$

- Para $\forall(\vec{x}, t) \Rightarrow$

$$\frac{X''}{X} = -k_1^2, \quad \frac{Y''}{Y} = -k_2^2, \quad \frac{Z''}{Z} = -k_3^2, \quad \frac{\ddot{T}}{T} = -\omega^2,$$

con

$$\frac{\omega^2}{c^2} = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2$$

.11

- Condición de borde en una caja cúbica de lado a con extremos fijos $\Rightarrow X = B \sin(k_1 x)$, con $k_i = n_i \pi / a$, y

$$\psi = \sum_{n_i} A(n_i) e^{-i\omega(n_i, t)} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{a}\right),$$

con

$$\omega(n_1, n_2, n_3) = \frac{c\pi}{a} \underbrace{\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}}_n = 2\pi\nu.$$

.12

1.1.1 Densidad de estados

- Número total de estados de modos normales (\vec{E}, \vec{B}) , con frecuencia $\nu < \nu_0$, en volumen \mathcal{V} :

$$\phi(\nu_0) = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi n^3, \text{ con } n^3 = \left(\frac{a\nu_0}{c\pi} \right)^3.$$

- Densidad de estados en intervalo de frecuencia $d\nu$, volumen \mathcal{V} :

$$\mathcal{N}(\nu) = \frac{d\phi(\nu)}{d\nu} = \frac{4\pi\nu^2}{c^3} \mathcal{V},$$

y la densidad de estados en intervalo de frecuencia $d\nu$, por unidad de volumen, es

$$\rho_\nu = \frac{4\pi\nu^2}{c^3}.$$

.13

1.1.1 Análisis clásico

- La energía total almacenada en los modos de vibración del campo (\vec{E}, \vec{B}) es la suma de cada $u_\nu \mathcal{V} = \epsilon_0 (E_x^2 + E_y^2) \mathcal{V}$.
- Para cada modo, el valor esperado de la energía en un intervalo $d\nu$ es

$$U_\nu = \mathcal{V} \langle u_\nu \rangle = \int d\nu \int dE_x dE_y p(E_x, E_y) u_\nu,$$

$$\text{donde } p(E_x, E_y) \propto e^{-\frac{u_\nu \mathcal{V}}{kT}}.$$

- con 2 grados de libertad de polarización por modo (i.e. E_x y E_y), cada uno contribuyendo un término cuadrático en la energía, el teorema de equipartición da $2 \times kT/2$ por modo.
- la densidad de modos Ec. 13 da la densidad de energía en un intervalo $d\nu$, y por unidad de volumen:

$$u(\nu) = kT \rho(\nu) = kT \frac{4\pi\nu^2}{c^3} \Rightarrow \text{catástrofe UV.}$$

.14

1.1.1 Propuesta de Planck

- Planck hip1: sacar promedio por modo cambiando $\int \rightarrow \sum$,

$$\langle U \rangle = \int \mathcal{P}(U) U dU \rightarrow \sum P(U) U, \text{ con } U = n\mathcal{U}.$$

- Planck hip2: esperamos que \mathcal{U} sea una función de la frecuencia, o sea $\mathcal{U} = \sum_i a_i \nu^i$, y por 'simplicidad' ponemos

$$\mathcal{U} = h\nu.$$

- Con estas hipótesis, el cálculo da $S_\nu = u_\nu c = \pi B_\nu$, con

$$B_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2 [\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1]},$$

y una comparación con el experimento permite ajustar $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$.

.15

Propiedades de la función de Planck

- Ley de Wien:

$$\left. \frac{dB_\nu}{d\nu} \right|_{\nu_{\max}} = 0 \Rightarrow \frac{h\nu}{kT} \approx 4,965,$$

$$\boxed{\frac{\lambda_{\max}}{\text{cm}} \frac{T}{\text{K}} = 0,29}, \text{ con } \lambda_{\max} = c/\nu_{\max}. \text{ OJO: } B_\lambda d\lambda = B_\nu d\nu.$$

- Ley de Stefan-Boltzmann:

$$\int B_\nu d\nu = B(T) = \frac{2h}{c^2} \left(\frac{kT}{h} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx,$$

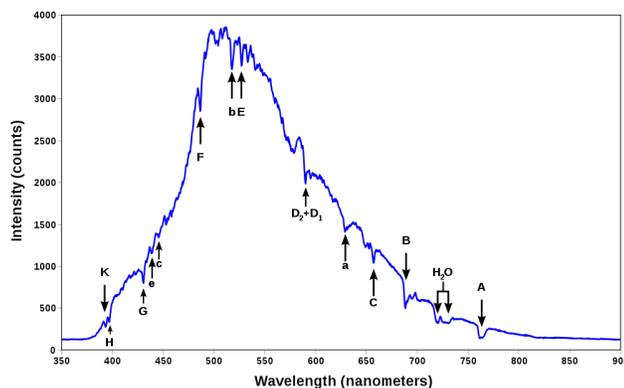
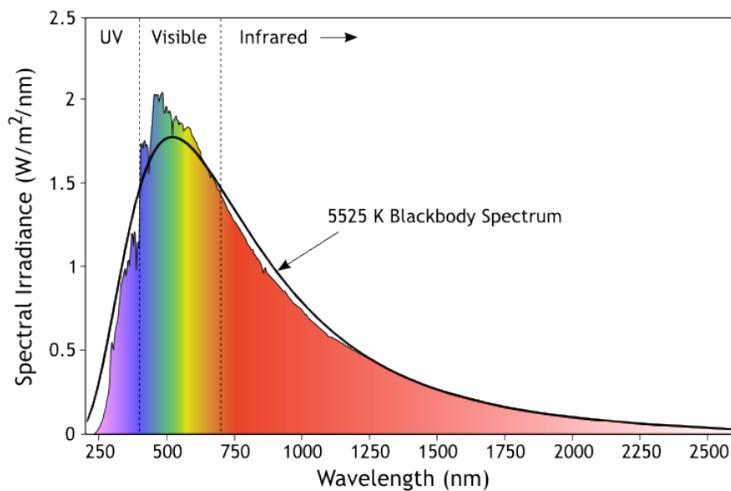
$B(T) = aT^4$, con $\sigma = a\pi = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$. Notar que $\pi B(T)$ es el flujo por unidad de área.

- Ley de Rayleigh-Jeans:

$$\lim_{h\nu \ll kT} B_\nu = \frac{2\nu^2}{c^2} kT \text{ caso clásico, } h \rightarrow 0.$$

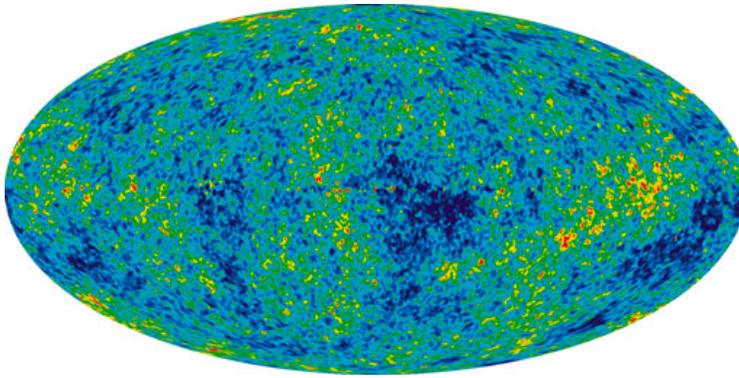
.16

Ejemplo: espectro solar



.17

Ejemplo: radiación de fondo



Ecuación de Einstein para $H = \dot{a}/a$, (+ universo isotrópico y homogéneo):

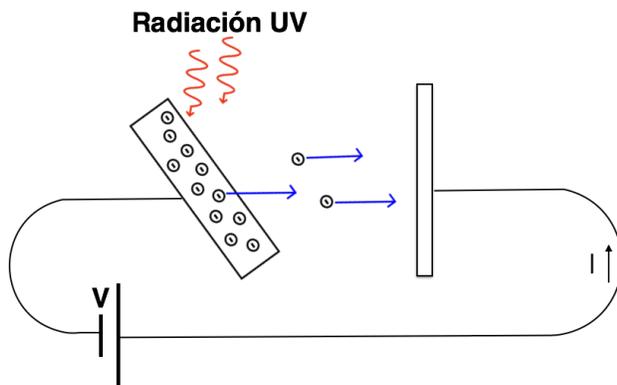
$$\underbrace{\frac{8}{3}\pi G \frac{\rho}{H}}_{\Omega_m} \pm \underbrace{\frac{1}{a^2 R^2 H}}_{\Omega_R} + \underbrace{\frac{\Lambda}{H^2}}_{\Omega_\Lambda} = 1,$$

$$\Omega_\Lambda \sim 0,7 \quad \Omega_R = 0, \quad \Omega_m \sim 0,3,$$

sólo 2 % de Ω_m es contribuido por bariones.

.18

1.2. Efecto fotoeléctrico



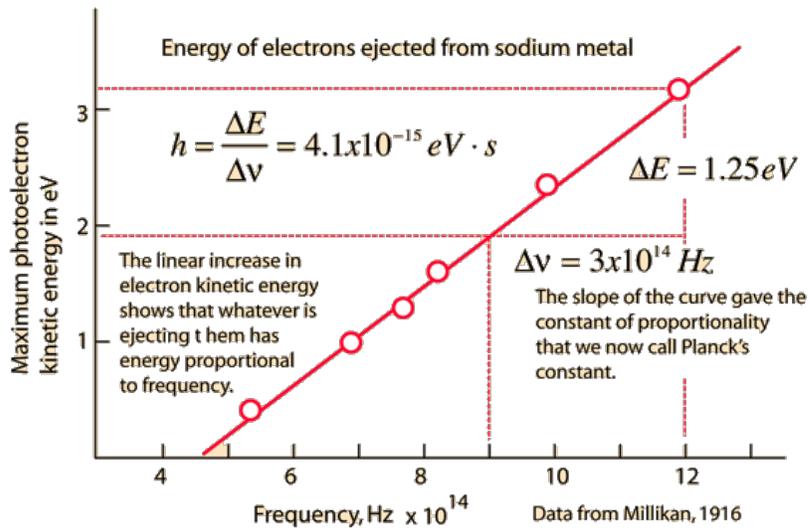
Para ν fijo, a medida que disminuye el flujo incidente S , disminuye I , y para S débil pasan e^- uno por uno (I estocástico).

Si variamos ν , con un voltaje fijo, hay una frecuencia de corte. Igualmente, hay un potencial de corte V_c para una cierta frecuencia ν . Einstein $\Rightarrow h\nu$ es cuanta de radiación, i.e. un *fotón*, y energía cinética del fotoelectrón es

$$K_{e^-} \leq h\nu - \phi, \text{ con } \phi \text{ función trabajo del material.}$$

.19

I es 0 cuando la diferencia de potencial en el condensador es igual a la energía cinética máxima de los fotoelectrones, $qV_c = K_{e^-}$. Medición de h por Millikan:

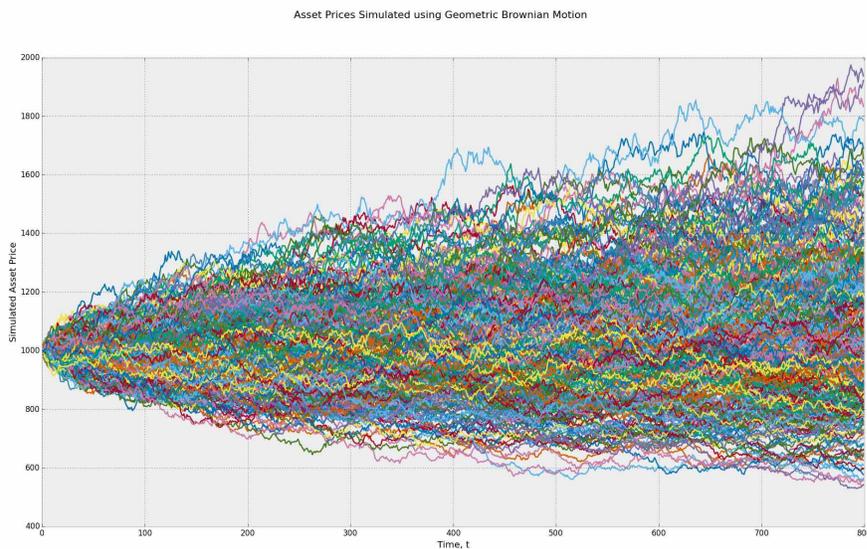
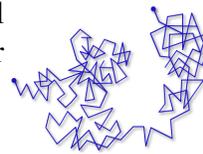


Pendiente da h : $\alpha = \arctan(h/e)$, con e conocido por experimento de Millikan en 1913.

.20

1.3. Movimiento browniano

- Marcha aleatoria: luego de N pasos en un tiempo t , de largo l y intervalo de tiempo promedio τ , el desplazamiento total \bar{R} tiene dispersión $\sigma = \langle R^2 \rangle = \alpha \sqrt{t}$. El factor α debe poder relacionarse con física microscópica.



.21

- En presencia de roce, la ec. de mov. 1D es

$$m\ddot{x} + \mu\dot{x} = F_{\text{ext}}, \quad (6)$$

para un campo de fuerza F_{ext} (ej. gravedad). Medimos μ si conocemos F_{ext} , observando la velocidad en estado estacionario: $\mu\dot{x} = F_{\text{ext}}$.

- Los impulsos que dan origen al mov. Browniano son una fuerza microscópica aleatoria. Queremos estimar $\langle R^2 \rangle(t) = 3\langle x^2 \rangle(t)$ (caso isotrópico).
- Tomamos $\langle x \times \text{Ec. 6} \rangle$. Reconocemos $\mu x\dot{x} = \frac{1}{2}\mu\dot{x}^2$, y

$$\langle mx\ddot{x} \rangle = m \underbrace{\left\langle \frac{d}{dt}(x\dot{x}) \right\rangle}_{\frac{d}{dt}\langle xv_x \rangle \sim 0 \text{ por hipótesis}} - \underbrace{m\langle (\dot{x})^2 \rangle}_{kT},$$

donde usamos la hipótesis de marcha aleatoria para aproximar $x \propto \sqrt{t} \rightarrow v_x \propto 1/\sqrt{t} \Rightarrow xv_x = \text{constante}$.

.22

- además, $\langle xF_x \rangle = 0$, y llegamos a que $\langle x \times \text{Ec. 6} \rangle \Leftrightarrow$

$$\left\langle \frac{\mu}{2} \frac{dx^2}{dt} \right\rangle - kT = 0 \Rightarrow \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{2kT}{\mu}.$$

- En 3D,

$$\sigma = \sqrt{\langle R^2 \rangle} = \sqrt{\frac{6kT}{\mu}t}.$$

- Medimos σ para despejar k , y con $PV = RT = \mathcal{N}kT$, estimamos \mathcal{N} , y luego tamaño atómico.

.23

1.4. Calor específico de los sólidos

1.1.4 Formulación clásica

- Consideremos el modelo de átomos con $3N$ osciladores armónicos en pequeñas perturbaciones.
- La energía de cada oscilador es $\epsilon = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}kq^2$, y en física clásica, $\langle \epsilon \rangle = kT$, de manera que la energía total es $E = 3NkT$, y el calor específico es $C_v = \partial E / \partial T = 3Nk$, constante en T .
- Sin embargo, la teoría clásica también predice que $\lim_{T \rightarrow 0} C_V = 0$: la diferencia de entropía entre dos estados $a \rightarrow b$ es

$$S_b - S_a = \int_{T_a}^{T_b} C_V \frac{dT}{T} = C_V \ln(T_b/T_a),$$

y si $T_a \rightarrow 0$, es necesario que $\lim_{T \rightarrow 0} C_V = 0$ para que S_b sea finito.

.24

1.1.4 Sólido de Einstein

- Radiación de frecuencia ω requiere cargas oscilando a la misma frecuencia \Rightarrow la cuantización del cuerpo negro sugiere que las cargas en el sólido, i.e. las paredes del horno, oscilan con el campo \vec{E}, \vec{B} .
- En una primera aproximación, seguimos el modelo clásico de $3N$ osciladores con la misma frecuencia natural $\omega = \sqrt{k/m}$.
- Einstein: la energía de cada oscilador también está cuantizada, al igual que la energía en cada modo normal del cuerpo negro, y la energía en un oscilador es

$$\epsilon_x = n_x \hbar \omega + \frac{1}{2},$$

donde el ‘punto zero’ $\frac{1}{2}$ fue introducido posteriormente en mecánica ondulatoria (y el principio de incerteza).

.25

- La energía por átomo sería entonces $\epsilon = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \hbar \omega$.
- Con estadística de Boltzmann $\langle \epsilon \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$, donde $Z = \sum_{n_x, n_y, n_z} \exp(-\beta(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \hbar \omega)$, es la función partición.
- El cálculo de $C_V = \partial E / \partial T = \partial(N \langle \epsilon \rangle) / \partial T$ da

$$C_V = \frac{3N \hbar \omega}{kT^2} e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} \left[\frac{\hbar \omega}{(-1 + \exp(\hbar \omega / kT))^2} \right].$$

- Se puede confirmar que $\lim_{T \rightarrow 0} C_V = 0$ y $\lim_{T \rightarrow \infty} C_V = 3Nk$.

.26

2. Teoría atómica

2.1. Radioactividad natural

- Becquerel (1894), Marie & Pierre Curie (1897) \rightarrow ley de decaimiento exponencial,

$$dN = -NP dt \Rightarrow N(t) = N(0) \exp(-Pt),$$

con vida media $T_{\frac{1}{2}} = \ln(2)/P$.

- Tipos de decaimientos:

- Decaimiento α : ${}^{238}\text{U} \rightarrow {}^{238}\text{Th} + \alpha$.

- Decaimiento β : β^- : ${}^{12}_5\text{B} \rightarrow {}^{12}_6\text{C} + e^- + \underbrace{\bar{\nu}}_{\text{anti-neutrino}}$. β^+ : ${}^{12}_7\text{N} \rightarrow {}^{12}_6\text{C} +$

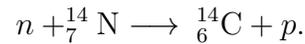
$e^+ + \underbrace{\nu}_{\text{neutrino}}$.

- Decaimiento γ : $({}^A_Z\text{P})^* \rightarrow {}^A_Z\text{P} + \gamma$, energías de fotones γ son cuantizadas, con $h\nu \sim \text{MeV}$, o sea \gg que los 13,6 eV típicos de transiciones atómicas.

.27

Ejemplo: datación ^{14}C

- Alta atmósfera (~ 15 km): bombardeo de rayos cósmicos solares produce neutrones que chocan con los núcleos de nitrógeno en el aire:



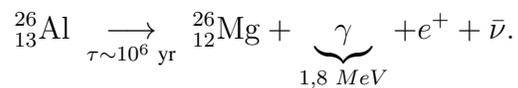
- materia orgánica (i.e. plantas) intercambian ^{14}C y al morir el ^{14}C decrece exponencialmente,



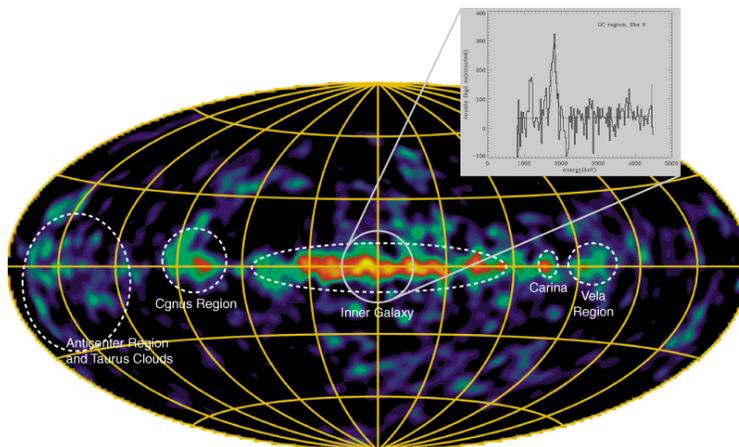
.28

Ejemplo: irradiación temprana del sistema solar.

- Diferenciación de asteroides debida a calentamiento de nebulosa presolar ($\lesssim 60$ Myr) puede ser explicado por altas abundancias de ${}^{26}_{12}\text{Mg}$, que es producto de decaimiento γ de ${}^{26}_{13}\text{Al}$:

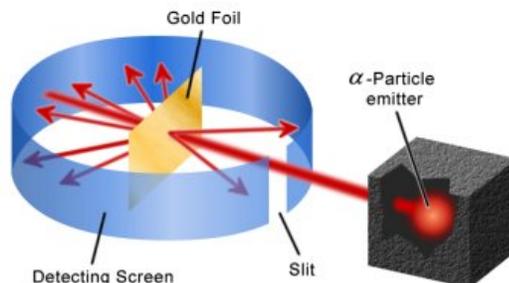


- ¿Cuál es la fuente de ${}^{26}\text{Al}$ que irradió al sistema solar?

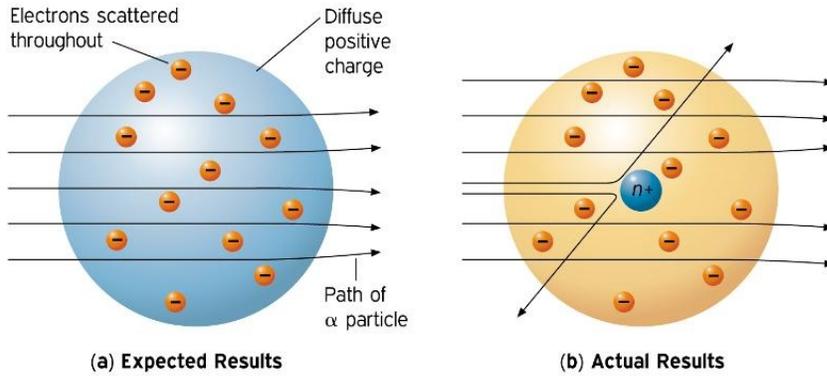


.29

2.2. Experimento de Rutherford



Serie de experimentos por Rutherford, Geiger y Marsden entre 1908 y 1913 conducen al descubrimiento del núcleo atómico.



.30

Modelo planetario del núcleo

- El descubrimiento del núcleo atómico permitió caracterizar los elementos usando (Rutherford 1911):

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\pi\epsilon_0 m v_0^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$

en que $d\sigma/d\omega$ es la fracción de partículas deflectadas en un ángulo $\theta \in [\theta, \theta + d\theta]$ si el haz incidente de partículas de masa m tiene velocidad $\vec{v}_0 \parallel \hat{z}$

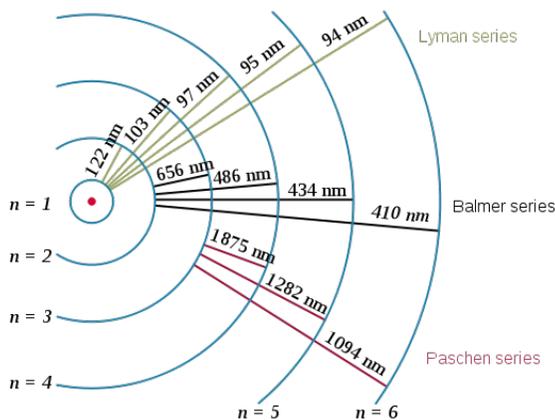
- ... Pero... Decaimiento radiativo de los electrones esperado en $\sim 10^{-10}$ s.

.31

2.3. Modelo de Bohr

Espectroscopía de HI

Modelo planetario de Bohr permite modelar el espectro de HI (Balmer 1885, Rydberg 1888):



$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad m > n, \quad (m, n) \in \mathbb{N},$$

donde $R_H = 109677,576 \text{ cm}^{-1}$ es la constante de Rydberg.

.32

Postulados

1. Existen estados estacionarios para electrones en equilibrio dinámico, según mecánica clásica pero sin irradiar.
2. Si electrón pasa de estado E_n a E_m emite/absorbe $h\nu_{nm} = E_m - E_n$.
3. Niveles de energía:

1: Las frecuencias de transición están dadas por la fórmula de Balmer

o

2: sólo son permitidas órbitas con $L = mvr = nh/2\pi$.

4. Principio de correspondencia, si $n \rightarrow \infty$ se recupera física clásica.

Tarea: demostrar que los Postulados 3.2 y 3.1 son equivalentes.

Tarea: comparar frecuencia clásica con frecuencia cuántica (en función del radio de la órbita).

.33

Regla de cuantización de Sommerfeld-Wilson

- ¿Qué relación existe entre cuantización de Planck ($E_n = nh\nu$) y Bohr ($L_n = n\hbar$)?
- Problema de Bohr: falla para átomos grandes.

Extensión del modelo de Bohr por Sommerfeld-Wilson:

$$\oint pdq = nh \quad \text{para sistemas ligados.}$$

- Órbitas circulares: $L \leftrightarrow \theta \Rightarrow$

$$\oint Ld\theta = 2\pi L = nh$$

.34

Ejemplo cuantización de S.-W.: Oscilador armónico

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2, \quad \text{es constante de movimiento,}$$

$$\Leftrightarrow \frac{q^2}{2E/(m\Omega^2)} + \frac{p^2}{2mE} = 1.$$

Familias de elipses con $a^2 = 2E/(m\Omega^2)$ y $b^2 = 2mE$,

$$\text{S.-W.} \Rightarrow \oint pdq = \pi ab = nh, \quad \Rightarrow E_n = nh\nu \quad \text{Planck-Einstein.}$$

.35

Bohr, S.-W., y átomos grandes

Consideremos Lagrangiano de Coulomb en esféricas:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 + \frac{e^2}{r} = L(r, \dot{r}, \dot{\theta}).$$

θ cíclica $\rightarrow \oint p_\theta d\theta = n_\theta h \rightarrow p_\theta = n_\theta \hbar$. En r ,

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \rightarrow \oint p_r dr = n_r h.$$

n_θ, n_r son enteros independientes, i.e. existen DOS números cuánticos para órbitas elípticas.

Tarea:

$$E(n) = -\frac{me^2}{2\hbar^2 n^2}, \text{ con } n = n_\theta + n_r \text{ \# número cuántico principal,}$$

$$a = (n_r + n_\theta)^2 \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{n^2 K^2}{me^2}, \quad b = n_\theta(n_r + n_\theta) \frac{\hbar^2}{me^2} = n_\theta \frac{nK^2}{me^2}.$$

.36

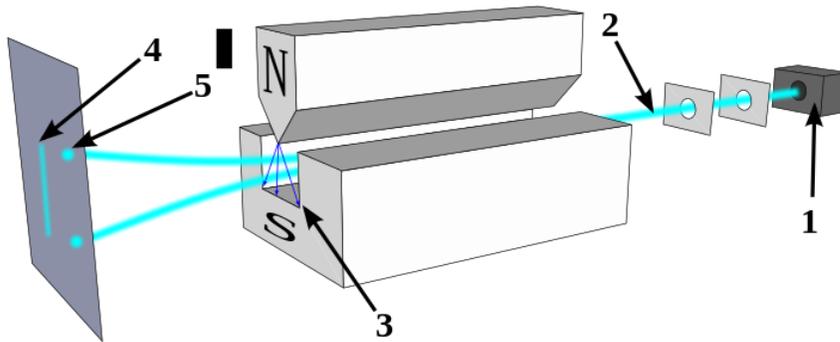
Parches de parches....

- Pb. nuevo: se observan menos líneas en espectro que lo predecido por $E_n - E_m = h\nu$. Hay transiciones que no existen para átomos con $Z > 1$. Se parcha teoría con *reglas de selección*.
- $E(n_\theta, n_r) \rightarrow$ pueden haber varios valores de n_r, n_θ dato $E \rightarrow$ estados cuánticos degenerados.
- Si se introduce \vec{B} externo, se levanta degeneración:
 - Nivel degenerado conduce a un número impar de niveles $\rightarrow 0 \leq l < n$ y $L_z = m\hbar$ con $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ (y resulta que $|L|^2 = l(l+1)\hbar^2$).
 - Nivel no degenerado igual se divide en DOS, con $m \sim s_z = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})\hbar$.

.37

Experimento de Stern-Gerlach

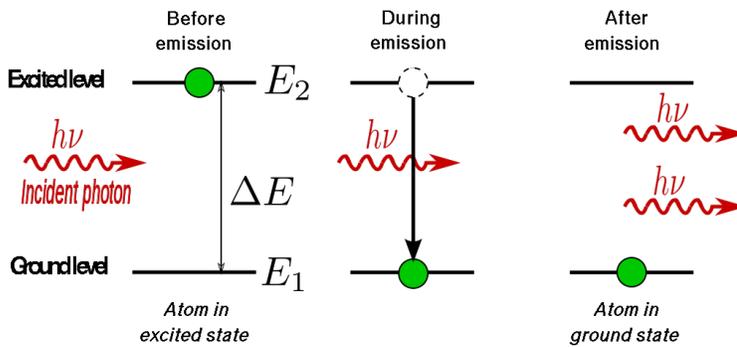
Observación de \vec{L} cuantizado (i.e. $L_z = m\hbar$) y spin del electrón (Stern-Gerlach 1922).



2.4. Coeficientes de Einstein

- Einstein (1916): emisión inducida.
- Balance detallado en la población de un sistema de dos niveles 1, 2 da la relación entre A_{21} , tasa de decaimientos radiativos espontáneos, B_{12} , tasa de excitaciones radiativas, y B_{21} , tasa de decaimientos *estimulados* (ver Feynman):

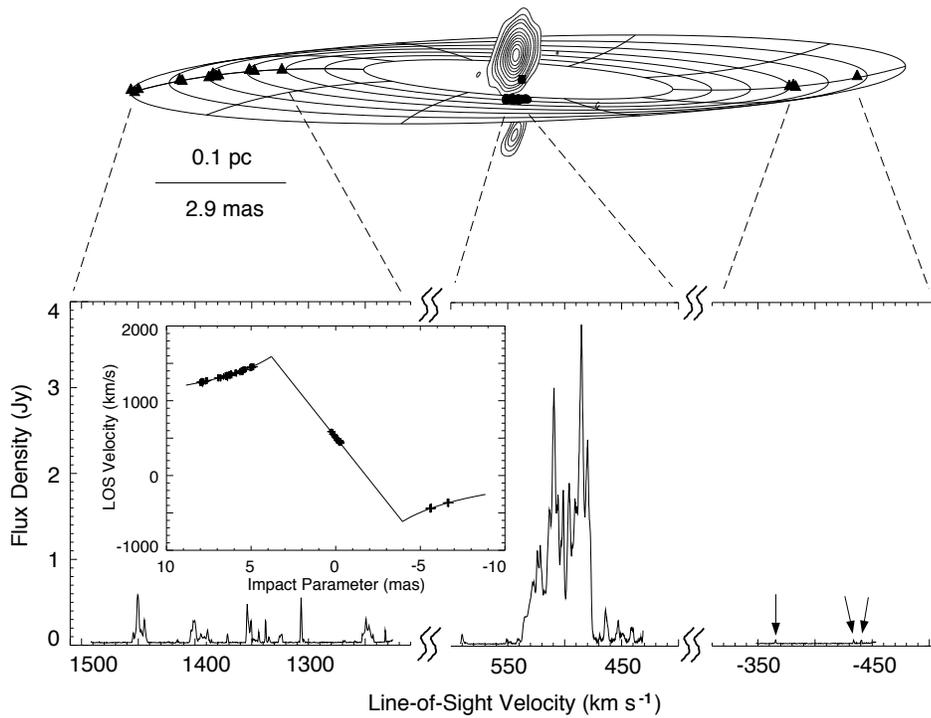
$$B_{21} = B_{12}g_1/g_2, \text{ y } B_{21} = \frac{c^2}{2h\nu^3}A_{21}.$$



$$E_2 - E_1 = \Delta E = h\nu$$

Ejemplo: masers astrofísicos

Dinámica de rotación en agujero negro de NGC 4528 usando masers de H₂O a 22 GHz (masa $\sim 10^7 M_\odot$, Miyoshi et al. 1995, distancia 7 Mpc, Herrnstein et al 1999)



.40

3. Mecánica ondulatoria

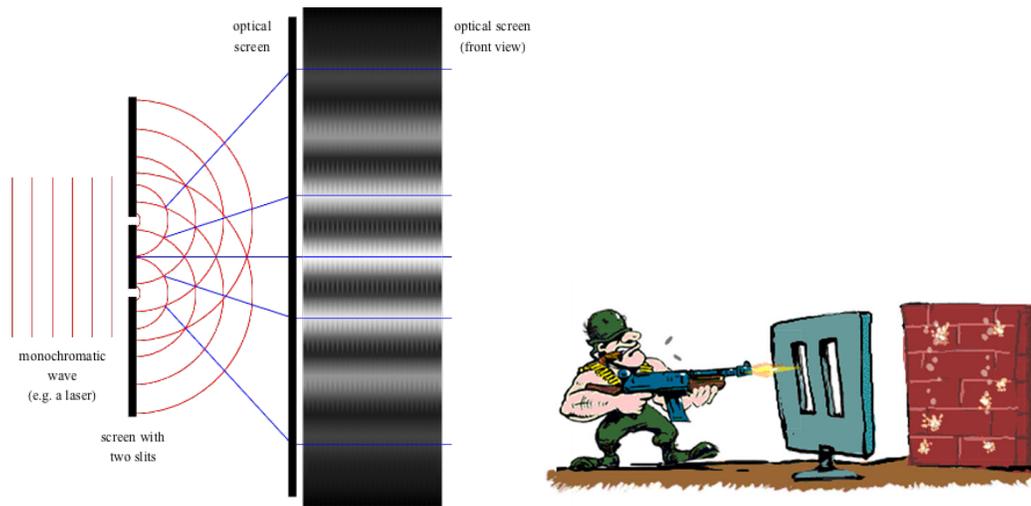
3.1. Dualidad onda-partícula

- Radiación:
 - onda λ, ν, c
 - partícula, $E = h\nu$, $p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$.
- Materia: también onda, De Broglie (1924), con $p = h/\lambda$.
 - → regla de cuantización de Bohr, $L = n\hbar$
 - → tamaño atómico (ver cátedra).

.41

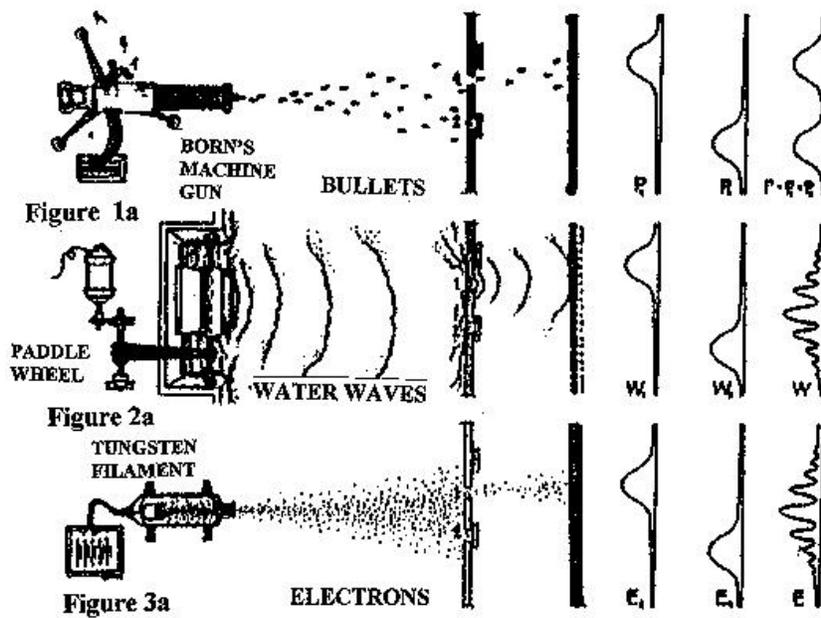
3.2. Principio de superposición

Para estudiar comportamiento ondulatorio de la materia, haces experimentos de comparativos onda/partículas: balas vs. rendijas de Young.



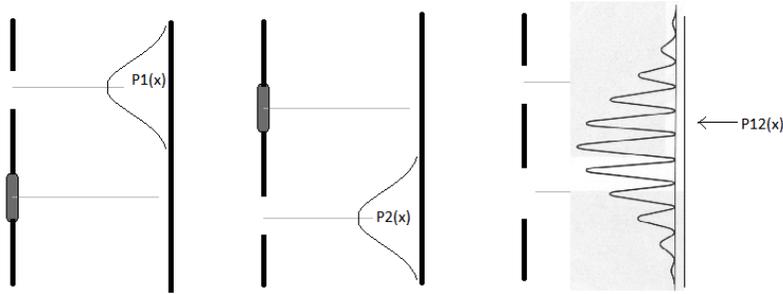
.42

Efectivamente, con electrones también se observa patrón de interferencia.

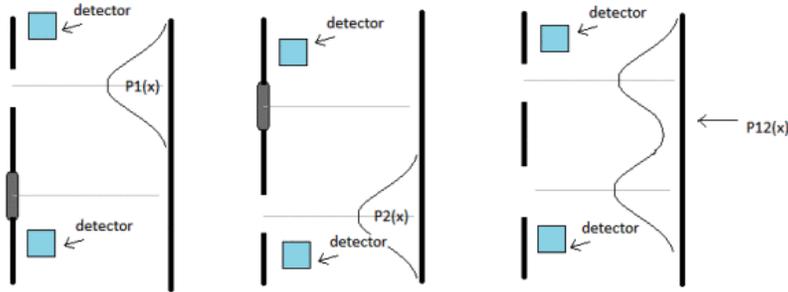


Para electrones el patrón de interferencia es el mismo que para la luz (o cualquier onda).

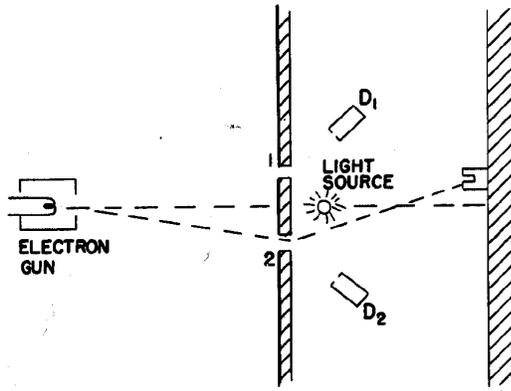
.43



Pero el detector cuenta electrones uno por uno, y son emitidos uno por uno, entonces debiera ser posible seguir trayectoria de cada electron.



$h\nu$ interactua con $e^- \rightarrow$ observemos con luz.



- Con L suficiente, efectivamente seguimos e^- y $P_{12} = P_1 + P_2$ sin interferencias.
- Quizás $h\nu$ perturba e^- ? Si bajamos L , llega un punto en que $P_{12} \neq P_1 + P_2$. Si bajando energía $h\nu$, cuando $\lambda > d$ ya no se distinguen rendijas 1 y 2 y $P_{12} \neq P_1 + P_2$.
- Heisemberg: “Es imposible diseñar un experimento que determine por cual hoyo pasan e^- y que no destruya patrón de interferencia”.

: función de onda

- Consideremos la propuesta ‘A’: “los e^- pasan por rendija 1 o 2”. Al ‘observar’ los e^- , ‘A’ es correcta. Pero si no se observa, ‘A’ no es válida.

- Asociamos una onda de probabilidad a los e^- tal que la densidad de probabilidad es

$$\rho = |\psi|^2, \text{ con } \psi(\vec{r}) \in \mathbb{C}.$$

- ¿Y, qué pasó con las balas? $\rightarrow \lambda \ll d$.

.46

: notación bra|ket

- Introducimos notación ‘bra|ket’ para describir el estado cuántico $|\psi\rangle$ (ver Feynman III, 2 y 3):
- Caso discreto,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n \underbrace{|\psi_n\rangle}_{\text{resultados posibles}},$$

con $\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \sum |c_n|^2$, y $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}$.

- Caso continuo,

$$|\psi\rangle = \int dk |\psi_k\rangle,$$

con $\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \int d^3x \psi^*(x)\psi(x)$, y $\langle\psi_k|\psi_l\rangle = \delta(k-j)$.

.47

. Ejemplo: rendijas de Young

- Estado de salida de la fuente (i.e. el cañon de e^-): $|s\rangle$.
- Estado de llegada en la pantalla TV: $|x\rangle$, i.e. rotulado en un continuo de posiciones en la pantalla.
- 2 posibles caminos: $|1\rangle$, e^- pasa por rendija 1, y $|2\rangle$, e^- pasa por 2.
- $\phi_1 = \langle x|1\rangle\langle 1|s\rangle$ y $\phi_2 = \langle x|2\rangle\langle 2|s\rangle$, ϕ_1 : amplitud de prob. de pasar por 1 y llegar a x , ϕ_1 : amplitud de prob. de pasar por 1 y llegar a x .
- Amplitud de prob. de llegar a x pasando por cualquier rendija es entonces

$$\phi_{12} = \phi_1 + \phi_2 = \langle x|1\rangle\langle 1|s\rangle + \langle x|2\rangle\langle 2|s\rangle.$$

- Sin observar paso de e^- , la función de onda del e^- es

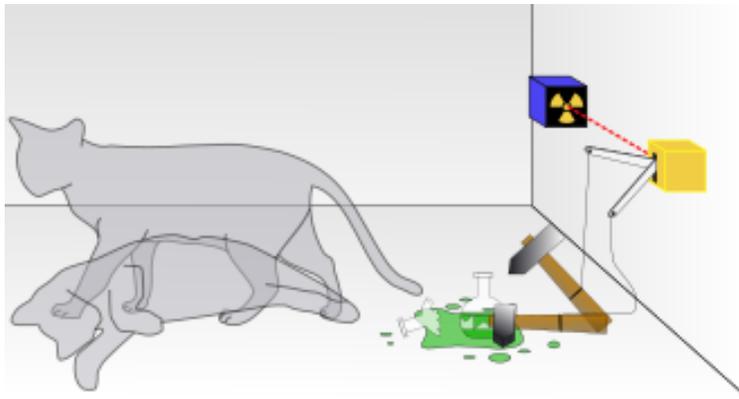
$$|\psi\rangle = \langle 1|s\rangle|1\rangle + \langle 2|s\rangle|2\rangle, \Rightarrow \text{superposición de estados}$$

- Al medir con un detector en x , obtenemos la prob. de *colapso* en x :

$$\langle x|\psi\rangle = \phi_{12} = \langle 1|s\rangle\langle x|1\rangle + \langle 2|s\rangle\langle x|2\rangle.$$

.48

. Ejemplo: Gato de Schrödinger.

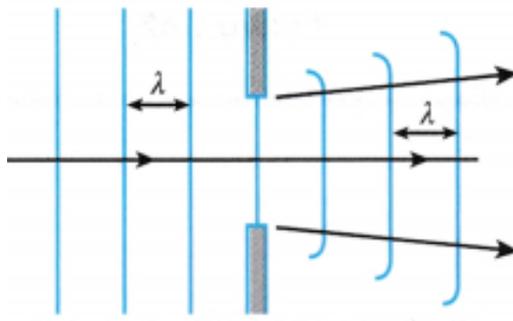


$$\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle$$

.49

3.3. Incerteza (x, p) , (t, E)

. Difracción de electrones.



La ranura permite determinar la posición de los e^- en dirección \hat{y} . Originalmente son emitidos con momentum $\vec{p} = p_x \hat{x}$, sin info en x . Como son difractados en dirección $\theta \sim \lambda/a$, debe haber una componente $\Delta p_y = \theta p_x \sim \frac{\lambda}{a} \frac{h}{\lambda} = h/\Delta y$.

$$\Rightarrow \Delta y \Delta p_y \sim h.$$

.50

Paquetes de ondas.

- Para una onda localizada, por ejemplo con un espectro Gaussiano, se cumple

$$\sigma_k \sigma_x = 1 \Leftrightarrow \sigma_p \sigma_x = \hbar.$$

- De la misma manera, para una señal de duración finita en el tiempo,

$$\sigma_\omega \sigma_t = 1 \Leftrightarrow \sigma_E \sigma_t = \hbar.$$

- En el caso general, no Gaussiano, se reemplazan estas relaciones por desigualdades, y el cálculo riguroso da

$$\Delta p_x \Delta x > \hbar/2 \text{ y } \Delta E \Delta t > \hbar/2$$

.51

3.4. Ecuación de Schrödinger

- Argumentos generales (ver cátedra) conducen a la propuesta de Schrödinger para la ecuación de movimiento de la función de onda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

- Cuantización de Schrödinger: los valores posibles de E son los autovalores del operador energía, $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$:

$$\langle\psi|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \int dx\psi^*i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

.52

Corriente de probabilidad

- Ecuación de continuidad para densidad de carga $\rho = |\psi|^2$:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0, \text{ con}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*).$$

- Para una onda plana monocromática,

$$\vec{j} = \frac{\hbar\vec{k}}{m}\rho = \vec{v}\rho.$$

.53

Ecuación de Klein-Gordon

$$\left. \begin{array}{l} E^2 = p^2c^2 + m^2c^4 \\ \vec{p} \sim -i\hbar\vec{\nabla} \\ E \sim i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \end{array} \right\} \longrightarrow -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\hbar^2\nabla^2\psi + m^2c^2\psi.$$

.54

3.5. Soluciones de la ecuación de Schrödinger

- Efecto tunel
- Átomo de hidrógeno
- Pozo de potencial infinito
- Oscilador armónico

.55

4. Spin y partículas idénticas

4.1. Spin y superposición

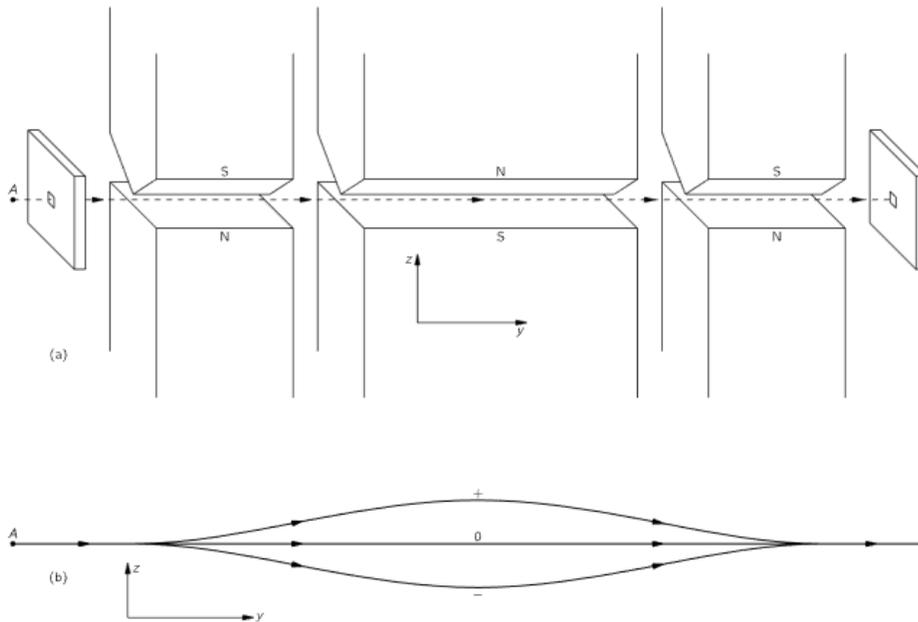
Spin

- El experimento de Stern-Gerlach (Sec.2.3) conduce a mediciones de momento magnético de spin $\vec{\mu}_S = -g_S\mu_B\vec{S}/\hbar$, con $g_S \approx 2$ para el e^- .
- Se confirman por experimentos estos ejemplos:
 - Spin 1: átomo neutro de C, núcleo de Deuterio D.
 - Spin 1/2: electrones.
 - Spin 0: partículas α .

.56

superposición

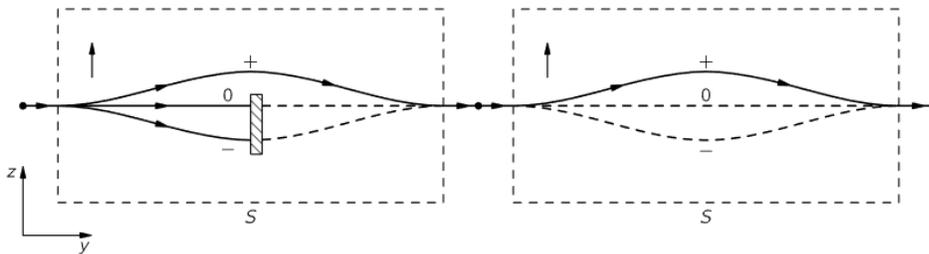
ver <http://www.feynmanlectures.caltech.edu/III.05.html>



Experimento SG modificado: dispositivo para separar y juntar partículas de spin 1.

.57

superposición



SG modificados en series y separación de spin: función de onda de una partícula con spin 1 sería, para un dispositivo S ,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |iS\rangle, \text{ con } i = -1, 0, 1.$$

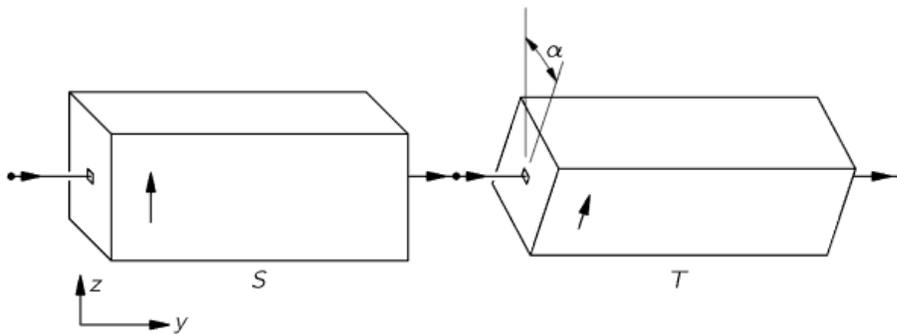
Una manera de representar el experimento sería:

$$\xrightarrow{N} \left\{ \begin{array}{c|c} 1 & \\ 0 & \\ -1 & \end{array} \right\}_S \xrightarrow{x_1 N} \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ -1 \end{array} \right\}_T \xrightarrow{x_1 N}$$

.58

superposición

SG modificados en series y mezcla de función de onda:



El primer aparato es S , y el segundo mide en otra dirección \Rightarrow es un aparato distinto T , en el cual

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |iT\rangle, \text{ con } i = -1, 0, 1.$$

Si S deja pasar solo $|\psi\rangle = |+S\rangle$, y T filtra solo en $|0T\rangle$, la función de onda de salida en “representación S” sería

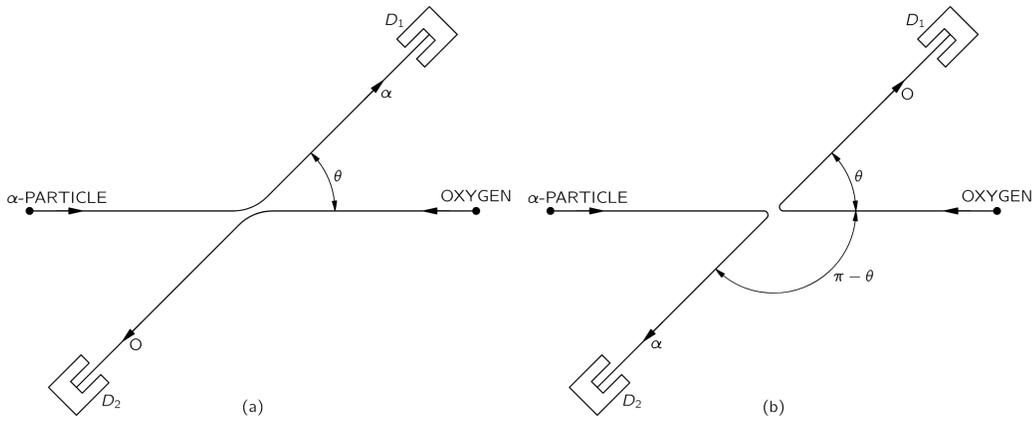
$$|\psi\rangle = \langle 0T|0S\rangle|0T\rangle = \sum_i \langle 0T|0S\rangle \langle iS|0T\rangle |iS\rangle.$$

\Rightarrow la salida es superposición de todos los estados S .

.59

4.2. Partículas idénticas

scattering

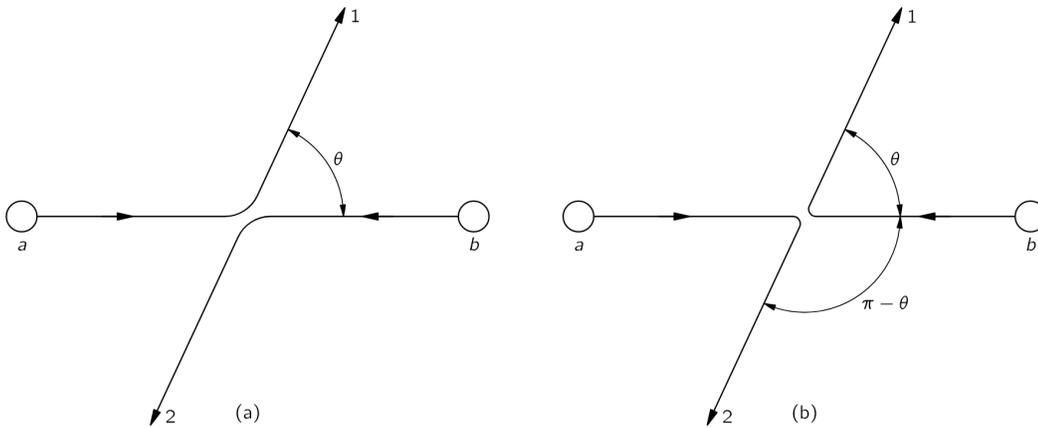


Prob. de detectar 'algo' en D_1 es

$$P_1 = |f_\alpha(\theta)|^2 + |f_O(\theta - \pi)|^2,$$

pero $|f_O(\theta)|^2 = |f_\alpha(\theta - \pi)|^2$. En general $f_O(\theta) = e^{i\delta} f_\alpha(\pi - \theta)$, y

$$P_1 = |f(\theta)|^2 + |f(\theta - \pi)|^2.$$



Si las dos partículas a y b son idénticas, $f_a(\theta) = e^{i\delta} f_b(\pi - \theta)$, y permutando, $f_b(\theta) = e^{i\delta} f_a(\pi - \theta)$. $\Rightarrow e^{i\delta} = \pm 1$, y $\psi_{a+b}(\theta) = f(\theta) \pm f(\pi - \theta)$.

- caso +: **BOSONES**, spin entero, ψ_{a+b} es simétrica ante permutaciones.
- caso -: **FERMIONES**, spin semi-entero, ψ_{a+b} es anti-simétrica.