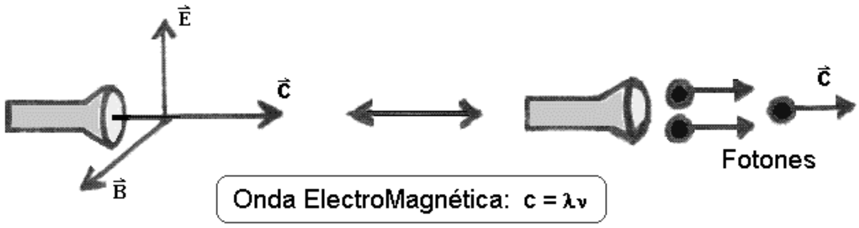
4.2 Mecánica Cuántica

4.2.1 Fotones

Vista con detalle, la luz está formada por fotones:



Fotones $\begin{cases} E = h\nu \\ p = h/\lambda \end{cases}$

$h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ Js = cte de Planck

4.2.2 Principio de Incertidumbre de Heissenberg

Enunciados de De Broglie (adaptados): **Ec 7**

- Todas las partículas son en el fondo "ondas de probabilidad" con υ **= E/h** y λ **= h/p**
- Todas las ondas son en el fondo una lluvia de partículas con **E = h**υ y **p = h/**λ

Las partículas están delimitadas en el espacio...

Física Clásica v/s Física Cuántica

Dado que toda partícula se representa cuánticamente como una onda, ciertas variables físicas estarán objetivamente indeterminadas.

Principio de incertidumbre de Heissenberg $\begin{cases} \Delta X\,\Delta p \geq \hbar/2 \\ \Delta E\,\Delta t \geq \hbar/2 \\ \hbar = h/(2\pi) \end{cases}$ Ec 8

IMPORTANTE:

* Δu corresponde exactamente a la "desviación estándar" de la variable "u"

* Nosotros calcularemos Δu del siguiente modo:

$$\Delta u = \frac{u_{máx} - u_{mín}}{2}$$

* A Δu le llamaremos el "margen de error" de la variable u

* Observemos que si el margen de error de la posición de una partícula es Δx = 4 m, entonces se puede afirmar que el tamaño de la partícula es de 8 m.

Ejemplo

- Si el "margen de error" del momentum es de 10^{-6} Kg m/s, la indeterminación de la posición será:

  $\Delta X \geq \hbar/(2\Delta p) = 5.3*10^{-29}$ m

- Esto significa que mientras la partícula se comporte como una una onda, su existencia estará "diseminada" en un intervalo de longitud mayor o igual que $5.3*10^{-29}$ m.
- Es decir, mientras la partícula se comporte cuánticamente, estará en todas las posiciones posibles dentro del intervalo mayor o igual que ΔX (pero no al 100% en cada posición, sino de un modo "ponderado")

NOTA

- Las partículas se comportan cuánticamente mientras su entorno sea cuántico.
- Cuando un ser humano realiza una medición, el entorno deja de ser cuántico por lo que la partícula deja de tener propiedades cuánticas (a esto se le llama "colapso de la función de onda")

EJERCICIO 7

Fotones y Heisenberg.

Un fotón posee una longitud de onda igual a $(5000 \pm 20)\,\text{Å}$ *. ¿Cuál es el margen de error mínimo permitido por el universo para la posición del fotón?*

Solución

$$\lambda_{mín} = 4980*10^{-10}\,m \Rightarrow p_{máx} = h/\lambda_{mín} = 1.331*10^{-27}\text{ Kg m/s}$$

$$\lambda_{máx} = 5020*10^{-10}\,m \Rightarrow p_{mín} = h/\lambda_{máx} = 1.321*10^{-27}\text{ Kg m/s}$$

Luego:

$$\Delta p = \frac{p_{máx} - p_{mín}}{2} = 5*10^{-30}\text{ Kg m/s}$$

De acuerdo con el Principio de Incertidumbre:

$$\Delta X_{mín} = (\hbar/2)/(\Delta p) = 1.06 * 10^{-5}\,m$$

4.2.3 El átomo de Hidrógeno

a) El Operador Laplaciano

El operador Laplaciano corresponde a la segunda derivada escalar en tres dimensiones, definida como:

$$\nabla^2\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$

Ec 9
Definición del Laplaciano de ψ

Importante:

$\frac{\partial \Psi}{\partial z}$ = Primera derivada de Ψ respecto de z

$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$ = Segunda derivada de Ψ respecto de z

Calcular la derivada "parcial" $\frac{\partial \Psi}{\partial z}$ significa derivar $\Psi(x, y, z)$, asumiendo que las variables que no son z se mantienen constantes.

Ejemplos:

a) $\Psi(x, y, z) = 3\, x\, y\, z^2 = (3\, x\, y)\, z^2$

Luego:

$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = (6\, x\, y)\, z$

b) $\Psi(x, y, z) = 2 \text{ Sen } x + 3 \text{ Sen } y + 4 \text{ Sen } z$

$= (2 \text{ Sen } x + 3 \text{ Sen } y) + 4 \text{ Sen } z$

Luego:

$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = 4 \text{ Cos } z$

Otros ejemplos:

Si $\Psi(x, y, z) = 2x^5 - \text{Sen}(3y) + 4yz^2$

$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = 10x^4 \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 40x^3$

$\frac{\partial \Psi}{\partial y} = -3\,\text{Cos}(3y) + 4z^2 \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = 9\,\text{Sen}(3y)$

$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = 8yz \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = 8y$

b) La Ecuación de Schrödinger

Para describir probabilísticamente una partícula cuántica, realice lo siguiente:

i) Escriba la energía potencial de la partícula: U(x, y, z)

ii) Resuelva la Ecuación de Schrödinger:

$$\boxed{\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(x, y, z)\,\Psi = E\,\Psi} \qquad \text{Ec 10}$$

Ec de Schrödinger

→ La ecuación dice: encuentre la función Ψ que satisfaga la igualdad.

→ Evidentemente: $E = E_k + U$

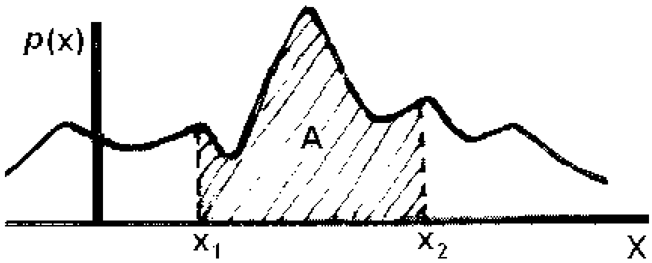
iii) La función ψ se denomina “función de onda”

iv) Calcule el módulo de ψ al cuadrado:

$$|\Psi|^2 \equiv p(x, y, z)$$

v) *p(x, y, z)* es la "función densidad de probabilidad" de la partícula en tres dimensiones.

Explicación en 1D (sólo eje X):



La probabilidad de que la partícula esté entre x_1 y x_2 es A

$$P(x_1 < x < x_2) = A = \int_{x_1}^{x_2} dx\, p(x)$$

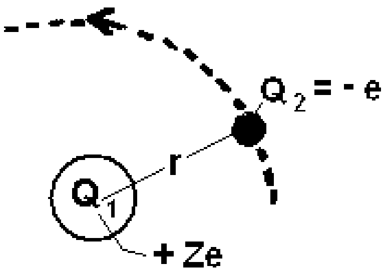
Obviamente:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, p(x) = 1 = P(-\infty < x < +\infty)$$

Este último cálculo corresponde a la probabilidad de que la partícula esté en algún lugar del universo (entre $-\infty$ y $+\infty$).

c) Atomos hidrogenoides

Un átomo hidrogenoide se caracteriza por tener un núcleo con Z protones y sólo un electrón de masa m orbitando en torno del núcleo.



$$U = \frac{KQ_1Q_2}{r}$$

$$U = \frac{K(Ze)(-e)}{r} = \frac{-ZKe^2}{r}$$

Si utilizamos la expresión correspondiente de U para resolver la Ecuación de Schrödinger, se obtienen las funciones de onda de un átomo hidrogenoide:

$$\Psi = R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \qquad \text{Ec 10}$$

Donde

$R_{n\ell}$ = Función radial

Depende de:

n = energía del electrón

ℓ = momentum angular

$Y_{\ell m}$ = Armónico esférico

Depende de:

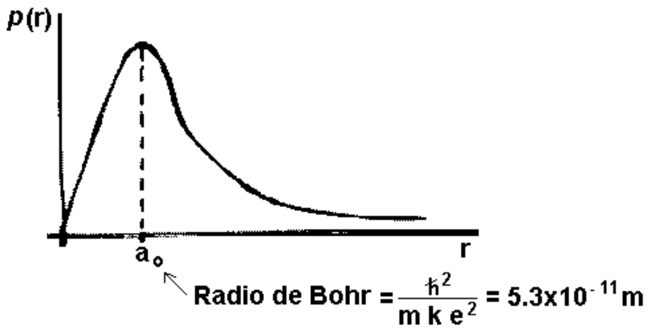
ℓ = momentum angular

m = momentum angular en el eje Z

(eje Z definido por B ext)

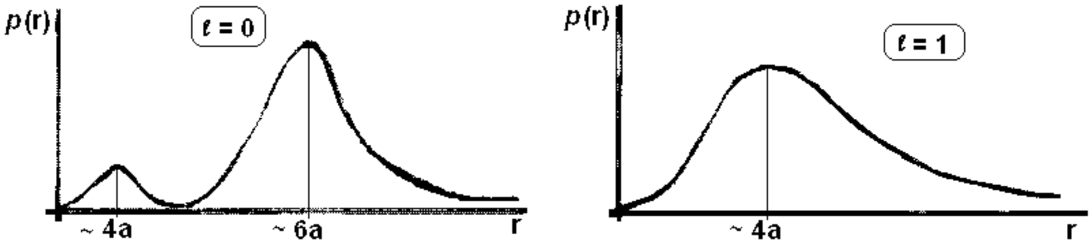
* Nivel fundamental o de menor energía del átomo de hidrógeno (Z = 1)

n = 1; ℓ = 0; m = 0



* Segundo nivel del átomo de hidrógeno (primer nivel excitado)

$$\text{Segundo Nivel}\begin{cases} n = 2 \\ \ell = 0 \Rightarrow m_\ell = 0 \\ \ell = 1 \Rightarrow m_\ell = -1, 0, +1 \end{cases}$$



Números Cuánticos

n = NC principal ("capa"): 1, 2, 3, ...

ℓ = NC secundario u orbital ("subcapa"): 0, 1, 2, 3, ..., (n-1)

m = NC azimutal o magnético: 0, ±1, ±2, ..., ± ℓ

En general:

$$r_{prom} = (n^2/z)\, a_o = (n^2/z)\left(\frac{\hbar^2}{mke^2}\right) \qquad \text{Ec 11}$$

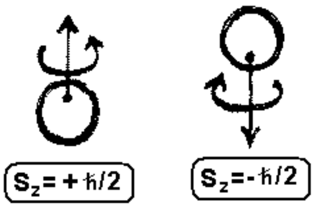
$$a_o = 5.3 * 10^{-11} \text{m}$$

$$E_{prom} = -(z/n)^2 E_o = -(z/n)^2\left(\frac{mk^2e^4}{2\hbar^2}\right)$$

$$E_{prom} = 13.6 \text{ eV} = 2.18 * 10^{-18} \text{J}$$

$$1 \text{ eV} = 1.6 * 10^{-19} \text{J}$$

NOTA: Aquí no hablaremos sobre el espín:



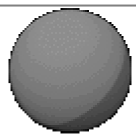
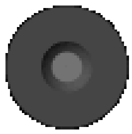
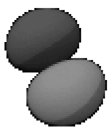
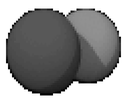
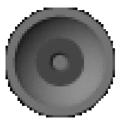
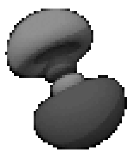
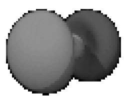
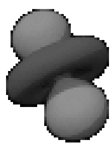
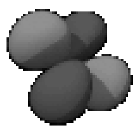
EJERCICIO 8

Atomos hidrogenoides.

Calcule la frecuencia del fotón que emite un átomo de helio hidrogenoide (He^+, Z = 2) cuando el electrón experimenta una transición desde el segundo al primer nivel.

Solución.

$$E_i = -(2^2/2^2) * 2.18 * 10^{-18} \approx -2.18 * 10^{-18} J$$
$$E_f = -(2^2/1^2) * 2.18 * 10^{-18} \approx -8.72 * 10^{-18} J$$
$$h\nu = |\Delta E| = |E_f - E_i| = 6.54 * 10^{-18} J$$
$$\nu \approx 9.86 * 10^{15} Hz$$

Orbitales Atómicos Hidrogenoides			
	m = 0	m = 1	m = 2
n = 1 l = 0			
n = 2 l = 0			
n = 2 l = 1			
n = 3 l = 0			
n = 3 l = 1			
n = 3 l = 2			

4.2.3 Fuerzas nucleares

a) Interacción nuclear "fuerte"

Características del núcleo atómico: z protones, n neutrones (n ~ z) y diám ~ 10^{-15} m = 1 fm.

Calculemos la fuerza de repulsión eléctrica entre dos protones separados por una distancia de 1 fm:

$$F_{el} = \frac{k\,e^2}{r^2} = \frac{9*10^9 * (1.6*10^{-19})^2}{(10^{-15})^2} = 230[\,N\,]$$

A pesar de la inmensa repulsión eléctrica, el núcleo no se desintegra. Luego, debe existir una fuerza de atracción "desconocida" capaz de mantener pegados a los protones y neutrones. Esta fuerza desconocida es la fuerza nuclear fuerte residual o "hadrónica".

Caracterísiticas de la fuerza nuclear fuerte residual.

$$F_F(p,p) = F_F(p,n) = F_F(n,n)$$

$$\text{Si}\begin{cases} r > 1\text{ fm} \Rightarrow F_F \longrightarrow 0 \\ \quad \text{(por eso esta fuerza no es normalmente percibida)} \\ r < 1\text{ fm} \Rightarrow F_F >> F_{el} \end{cases}$$

NOTA: Aquí no hablaremos de la interacción nuclear fuerte fundamental o de color (atracción y repulsión entre quarks).

b) Interacción nuclear "débil" o férmica.

Es la fuerza que <u>intenta</u> evitar que la materia radiactiva se desintegre (esta fuerza siempre termina perdiendo la batalla)

Si en una desintegración radiactiva se emite un "neutrino", podemos afirmar que la partícula original se mantenía estable gracias a la fuerza débil.

Ejemplo:

$$\pi^+ \longrightarrow \mu^+ + \nu_\mu \begin{cases} \pi^+ = \text{pión } (+) \\ \mu^+ = \text{muón } (+) \\ \nu_\mu = \text{Neutrino del muón} \begin{cases} Q = 0 \\ m \sim 0 \end{cases} \end{cases}$$

Caracterísitcas de la fuerza débil.

$F_D << F_F$

$$\text{Si}\begin{cases} r > (r_{\text{núcl}}/1000) \Rightarrow F_D = 0 \\ r < (r_{\text{núcl}}/1000) \Rightarrow F_D > 0 \end{cases}$$

~~Opcional: **Teoría Formal de la Mecánica Cuántica**~~
~~1) Todo sistema cuántico se representa como la suma ponderada de los estados posibles an los que puede encontrarse el sistema:~~ $\cancel{\Psi_{sist} = \alpha_1\Psi_1 + \alpha_2\Psi_2 + \ldots + \alpha_n\Psi_n}$ ~~Donde~~ $\cancel{\Psi_{sist} =}$ ~~función de onda del sistema (suma ponderada o superposición de estados)~~ $\cancel{\Psi_i =}$ ~~función de onda de un estado específico o "puro".~~ ~~Importante: los estados puros son simultáneamente incompatibles. Ejemplo: espín hacia arriba y espín hacia abajo.~~ $\cancel{\alpha_i =}$ ~~raíz cuadrada de la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado cuántico~~