Astronomía estelar

2024

prof Radostin Kurtev

Clase 4 Mecánica cuántica.

MECÁNICA CUÁNTICA Y DUALIDAD DE PARTÍCULAS

El último acto de la revolución cuántica comenzó con las reflexiones de un príncipe francés, **Louis de Broglie (1892-1987)**. Reflexionando sobre la dualidad ondapartícula descubierta recientemente para la luz, planteó una pregunta profunda: si la luz (clásicamente se piensa que es una onda) podría exhibir las características de las partículas, ¿no podrían las partículas manifestar a veces las propiedades de las ondas?

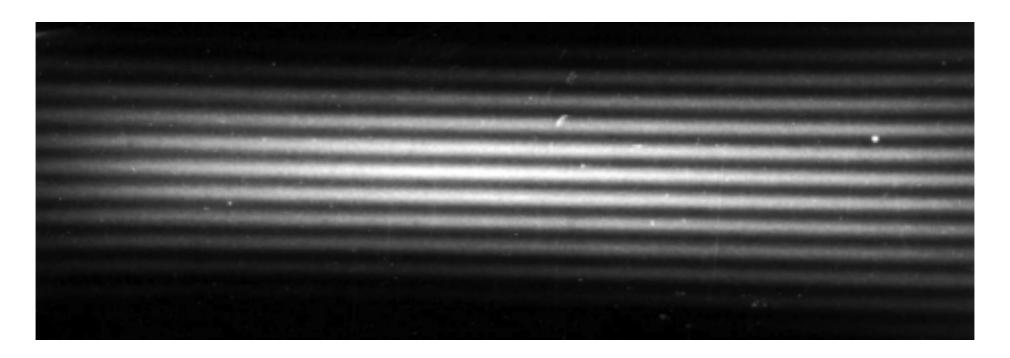
Longitud de onda y frecuencia de de Broglie

En su Ph.D. tesis, de Broglie extendió la dualidad onda-partícula a toda la naturaleza. Los fotones transportan tanto la energía E como el momento p, y estas cantidades están relacionadas con la frecuencia v y la longitud de onda λ de la onda de luz por:

$$v = \frac{E}{h}$$

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

- de Broglie propuso que estas ecuaciones se usen para definir una frecuencia y una longitud de onda para todas las partículas. La longitud de onda y frecuencia de De Broglie describen no solo fotones sin masa, sino también electrones masivos, protones, neutrones, átomos, moléculas, personas, planetas, estrellas y galaxias.
- Esta propuesta aparentemente escandalosa de ondas de materia ha sido confirmada en innumerables experimentos.



- La figura muestra el patrón de interferencia producido por los electrones en un experimento de doble rendija. El experimento de doble rendija electrónica puede explicarse solo por el comportamiento ondulatorio de los electrones, y cada electrón se propaga a través de ambas rendijas.
- La dualidad onda-partícula se aplica a todo en el mundo físico; todo exhibe sus propiedades de onda en su propagación y manifiesta su naturaleza de partículas en sus interacciones.

Example 4.1. Compare the wavelengths of a free electron moving at 3×10^6 m s⁻¹ and a 70-kg man jogging at 3 m s⁻¹. For the electron,

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} = 0.242 \text{ nm},$$

which is about the size of an atom and much shorter than the wavelength of visible light. Electron microscopes utilize electrons with wavelengths one million times shorter than visible wavelengths to obtain a much higher resolution than is possible with optical microscopes.

The wavelength of the jogging man is

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_{\text{man}}v} = 3.16 \times 10^{-36} \,\text{m},$$

which is completely negligible on the scale of the everyday world, and even on atomic or nuclear scales. Thus the jogging gentleman need not worry about diffracting when returning home through his doorway! ¿Cuáles son las ondas que están involucradas en la dualidad onda-partícula de la naturaleza? En un experimento de doble rendija, cada fotón o electrón debe pasar a través de ambas rendijas, ya que el patrón de interferencia se produce por la interferencia constructiva y destructiva de las dos ondas. Por lo tanto, la onda no puede transmitir información acerca de dónde está el fotón o el electrón, sino solo dónde puede estar. La onda es una probabilidad, y su amplitud se denota con la letra griega - Ψ (psi). El cuadrado de la amplitud de onda, $|\Psi|^2$, en una ubicación determinada, describe la probabilidad de encontrar el fotón o el electrón en esa ubicación. En el experimento de doble rendija, los fotones o electrones nunca se encuentran donde las ondas de las rendijas 1 y 2 han interferido destructivamente, es decir, donde $|\Psi_1 + \Psi_2|^2 = 0$.

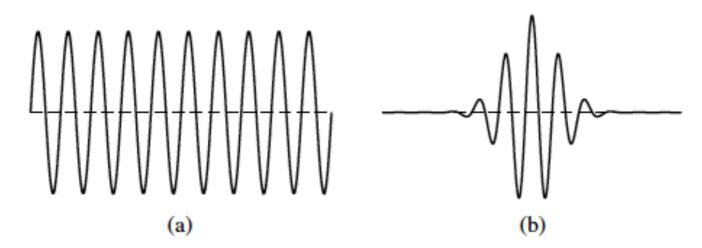


FIGURE 10 Two examples of a probability wave, Ψ : (a) a single sine wave and (b) a pulse composed of many sine waves.

Principio de incertidumbre de Heisenberg

Los atributos ondulatorios de la materia conducen a conclusiones inesperadas de extrema importancia para la astronomía. Por ejemplo, considere la Figura (a). La onda de probabilidad, Ψ (psi) es una onda sinusoidal, con una longitud de onda precisa λ . Por lo tanto, el impulso p = h / λ de la partícula descrita por esta onda se conoce exactamente. Sin embargo, como $|\Psi|^2$ consiste en un número de máximos igualmente altos que se extienden a $x = \pm \infty$, la ubicación de la partícula es totalmente incierta. La posición de la partícula se puede reducir si se agregan varias ondas sinusoidales con diferentes longitudes de onda, por lo que interfieren destructivamente entre sí en casi todas partes. La Figura 10 (b) muestra la combinación resultante de ondas, y es aproximadamente cero en todas partes excepto en una ubicación. Ahora la posición de la partícula puede determinarse con mayor certeza porque $|\Psi|^2$ es grande solo para un rango estrecho de valores de x. Sin embargo, el valor del momento de la partícula se ha vuelto más incierto porque - ahora es una combinación de ondas de varias longitudes de onda. Esta es la compensación intrínseca de la naturaleza: la incertidumbre en la posición de una partícula, Δx la incertidumbre en su momento, Δp , están inversamente relacionadas. A medida que uno disminuye, el otro debe aumentar. **Esta** incapacidad fundamental de una partícula para tener simultáneamente una posición bien definida y un momento bien definido es resultado directo de la dualidad ondapartícula de la naturaleza. El físico alemán, Werner Heisenberg (1901-1976), colocó esta "falta de claridad" inherente del mundo físico en un marco teórico firme. Demostró que la incertidumbre en la posición de una partícula multiplicada por la incertidumbre en su momento debe ser al menos tan grande como $\hbar/2$:

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{1}{2} \, \hbar.$$

$$\Delta x \, \Delta p \approx \hbar.$$

 $\Delta E \Delta t \approx \hbar$.

Example 4.2. Imagine an electron confined within a region of space the size of a hydrogen atom. We can estimate the minimum speed and kinetic energy of the electron using Heisenberg's uncertainty principle. Because we know only that the particle is within an atom-size region of space, we can take $\Delta x \approx a_0 = 5.29 \times 10^{-11}$ m. This implies that the uncertainty in the electron's momentum is roughly

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} = 1.98 \times 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}.$$

Thus, if the magnitude of the momentum of the electron were repeatedly measured, the resulting values would vary within a range $\pm \Delta p$ around some average (or *expected*) value. Since this expected value, as well as the individual measurements, must be ≥ 0 , the expected value must be at least as large as Δp . Thus we can equate the minimum expected value of the momentum with its uncertainty: $p_{\min} \approx \Delta p$. Using $p_{\min} = m_e v_{\min}$, the minimum speed of the electron is estimated to be

$$v_{\rm min} = \frac{p_{\rm min}}{m_e} \approx \frac{\Delta p}{m_e} \approx 2.18 \times 10^6 \,\mathrm{m \, s^{-1}}.$$

The minimum kinetic energy of the (nonrelativistic) electron is approximately

$$K_{\min} = \frac{1}{2} m_e v_{\min}^2 \approx 2.16 \times 10^{-18} \text{ J} = 13.5 \text{ eV}.$$

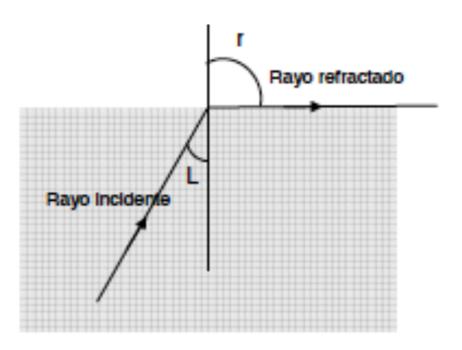
This is in good agreement with the kinetic energy of the electron in the ground state of the hydrogen atom. An electron confined to such a small region *must* move rapidly with at least this speed and this energy. This subtle quantum effect is responsible for supporting white dwarf and neutron stars against the tremendous inward pull of gravity.

Túnel Mecánico Cuántico

Cuando un rayo de luz intenta viajar desde un prisma de vidrio al aire, puede experimentar una reflexión interna total si alcanza la superficie en un ángulo mayor que el ángulo crítico θc, donde el ángulo crítico está relacionado con los índices de refracción del vidrio y el aire por:

$$\sin \theta_c = \frac{n_{\rm air}}{n_{\rm glass}}.$$

Este resultado familiar es, sin embargo, **sorprendente** porque, a pesar de que el rayo de luz es **totalmente reflejado, el índice de refracción del aire exterior aparece en esta fórmula**. De hecho, la onda electromagnética entra al aire, pero deja de ser oscilatoria y en su lugar muere de forma exponencial. En general, cuando una onda clásica como en el agua o una onda de luz entra en un medio a través del cual no se puede propagar, se vuelve evanescente y su amplitud decae exponencialmente con la distancia.



Esta **reflexión interna total** puede de hecho frustrarse al colocar otro prisma al lado del primer prisma para que sus superficies casi toquen (pero no del todo). Entonces la onda evanescente en el aire puede ingresar al segundo prisma antes de que su amplitud se haya extinguido por completo. La onda electromagnética una vez más se vuelve oscilatoria al entrar en el vidrio, por lo que el rayo de luz ha viajado de un prisma a otro sin pasar por el espacio de aire entre los prismas. En el lenguaje de las partículas, los fotones se han **tunelizado** de un prisma a otro sin viajar en el espacio entre ellos.

- La dualidad onda-partícula de la naturaleza implica que las partículas también pueden pasar por un túnel a través de una región de espacio (una barrera) en el que no pueden existir de forma clásica, como se ilustra en la figura.
- La la barrera no debe ser demasiado ancha (no más de unas pocas longitudes de onda de partículas); de lo contrario, la amplitud de la onda evanescente habrá disminuido a casi cero.
- Esto es consistente con el principio de incertidumbre de Heisenberg, lo que implica que la ubicación de una partícula no se puede determinar con una incertidumbre menor que su longitud de onda. Por lo tanto, si la barrera tiene solo unas pocas longitudes de onda, la partícula puede aparecer repentinamente en el otro lado de la barrera.
- La penetración de la barrera es extremadamente importante en el decaimiento radiactivo, donde las partículas alfa salen tunelizando del núcleo de un átomo; en la electrónica moderna, donde es la base para el "diodo túnel"; y dentro de las estrellas, donde las tasas de reacciones de fusión nuclear dependen del efecto túnel.

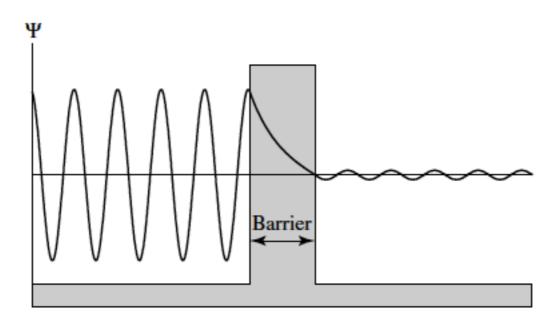


FIGURE 11 Quantum mechanical tunneling (barrier penetration) of a particle traveling to the right.

La ecuación de Schrödinger y el átomo mecánico cuántico

¿Cuáles son las implicaciones para el modelo de Bohr del átomo de hidrógeno? El principio de incertidumbre de Heisenberg no permite órbitas clásicas, con sus valores simultáneamente precisos de la posición y el momento del electrón. En cambio, los **orbitales electrónicos** deben imaginarse cómo **nubes borrosas de probabilidad**, con las nubes siendo **más "densas"** en las regiones donde es **más probable** que se encuentre el electrón. En **1925** era inminente una ruptura completa con la física clásica, una que incorporaría completamente las ondas de materia de de Broglie. Las ecuaciones de Maxwell de electricidad y magnetismo se pueden modificar para producir una ecuación de onda para las ondas electromagnéticas que describen la propagación de los fotones. Del mismo modo, una ecuación de onda propuesta en **1926** por **Erwin Schrödinger (1877-1961)**, un físico austriaco, condujo a una verdadera mecánica cuántica, el análogo cuántico de la mecánica clásica que se originó con Galileo y Newton.

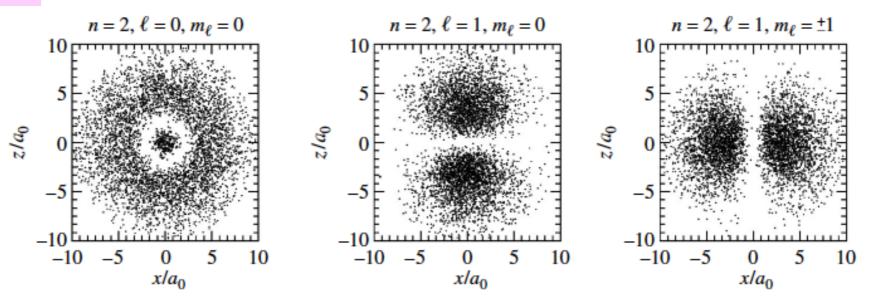
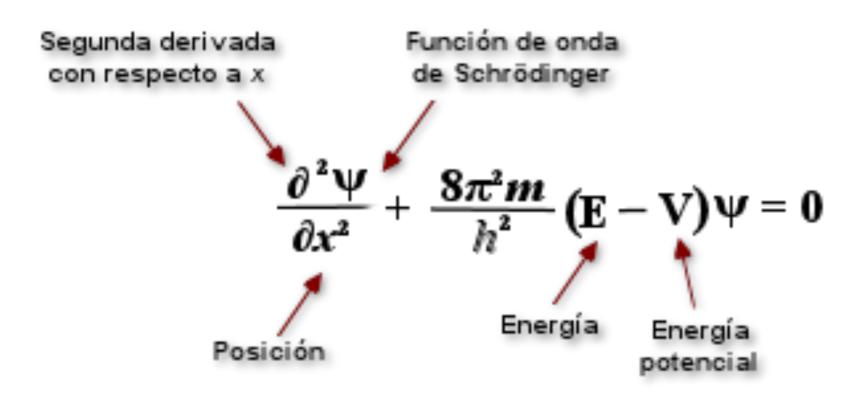


FIGURE 12 Electron orbitals of the hydrogen atom. Left: 2s orbital. Middle: 2p orbital with $m_{\ell} = 0$. Right: 2p orbital with $m_{\ell} = \pm 1$. The quantum numbers n, ℓ , and m_{ℓ} are described in the text.

La ecuación de Schrödinger se puede resolver para las ondas de probabilidad que describen los valores permitidos de la energía, momento, etc. de una partícula, así como la propagación de la partícula a través del espacio. En particular, la ecuación de Schrödinger puede resolverse analíticamente para el átomo de hidrógeno, dando exactamente el mismo conjunto de energías permitidas que las obtenidas por Bohr.



Ψ: función de onda

111: masa del electrón

\hbar : constante de Planck

 \mathbf{E} : energía total del electrón (dependen de sus coordenadas $x,\,y,\,z$)

 ${f V}$: energía potencial del electrón (dependen de sus coordenadas $x,\,y,\,z$)

Además del **número cuántico principal n**, Schrödinger encontró que se requieren dos **números cuánticos adicionales**, ℓ - **azimutal y m** $_{\ell}$ - **magnético**, para una descripción completa de los orbitales de electrones. Estos números adicionales describen el vector de momento angular, L, del átomo. En lugar de la cuantificación utilizada por Bohr, la solución a la ecuación de Schrödinger muestra que los valores permitidos de la magnitud del momento angular L son en realidad:

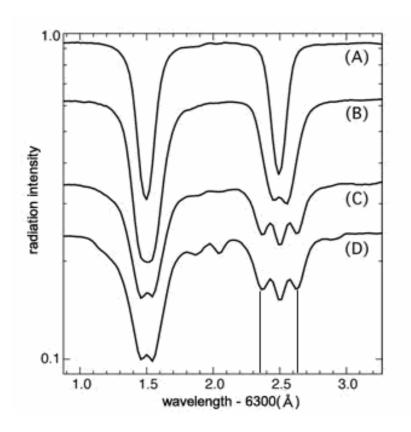
$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar, \qquad L = n\hbar.$$

donde $\ell = 0, 1, 2, ..., n - 1, y n es el número cuántico principal que determina la energía.$

Tenga en cuenta que es una práctica común referirse a los números cuánticos de momento angular por sus designaciones espectroscópicas históricas s, p, d, f, g, h, etc., correspondientes a $\ell = 0$, 1, 2, 3, 4, 5, etc. Cuando se usa el número cuántico principal asociado en combinación con el número cuántico de momento angular, el número cuántico principal precede a la designación espectroscópica. Por ejemplo, (n = 2, $\ell = 1$) corresponde a 2p, y (n = 3, $\ell = 2$) se da como 3d. Esta notación se usó en la leyenda de las figuras.

https://www.youtube.com/watch?v=zwisiN5XWh8

n Nivel	/ Subnivel	m 2 I + 1 orbital	m _s Giro	Número de e
1	0 (s)	0	+ 1/2, - 1/2	2
2	0 (s)	0	+ 1/2, - 1/2	8
		- 1(p _x)	+ 1/2, - 1/2	
	1 (p)	0 (p _y)	+ 1/2, - 1/2	
		+ 1 (p _z)	+ 1/2, - 1/2	
3	0 (s)	0	+ 1/2, - 1/2	18
	1 (p)	- 1(<i>p</i> _x)	+ 1/2, - 1/2	
		0 (p _y)	+ 1/2, - 1/2	
		+ 1 (p _z)	+ 1/2, - 1/2	
	2 (d)	- 2	+ 1/2, - 1/2	
		-1	+ 1/2 , - 1/2	
		0	+ 1/2 , - 1/2	
		+1	+ 1/2 , - 1/2	
		+ 2	+ 1/2 , - 1/2	
4	0 (s)	0	+ 1/2 , - 1/2	32
		- 1 (p _x)	+ 1/2 , - 1/2	
	1 (p)	$0 (p_y)$	+ 1/2 , - 1/2	
		+ 1 (pz)	+ 1/2 , - 1/2	
	2 (d)	-2	+ 1/2 , - 1/2	
		-1	+ 1/2 , - 1/2	
		0	+ 1/2 , - 1/2	
		+1	+ 1/2 ,- 1/2	
		+ 2	+ 1/2 , - 1/2	
	3 (1)	- 3	+ 1/2 , - 1/2	
		- 2	+ 1/2 , - 1/2	
		-1	+ 1/2 , - 1/2	
		0	+ 1/2, - 1/2	
		+1	+ 1/2 , - 1/2	
		+2	+ 1/2 , - 1/2	
		+3	+ 1/2 , - 1/2	



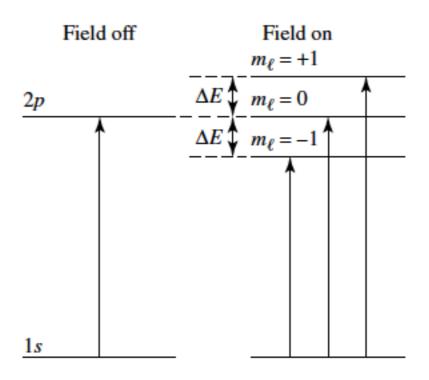


FIGURE 13 Splitting of absorption lines by the Zeeman effect.

El componente z del vector de momento angular, L_z , puede asumir solo los valores $L_z = m_\ell \hbar$, con m_ℓ igual a cualquiera de los $2\ell + 1$ enteros entre $-\ell$ y $+ \ell$ inclusive. Así el vector de momento angular puede apuntar en $2\ell + 1$ direcciones diferentes. Para nuestros propósitos, el punto importante es que los valores de la energía de un átomo de hidrógeno aislado no dependen de ℓ y m_ℓ . En ausencia de una dirección preferida en el espacio, la dirección del momento angular no tiene ningún efecto sobre la energía del átomo. Se dice que diferentes orbitales, etiquetados por diferentes valores de ℓ y m_ℓ (ver Figura anterior), son **degenerados** si tienen el mismo valor que el número cuántico principal n y, por lo tanto, tienen la misma energía. Los electrones que hacen una transición desde un orbital dado a uno de varios orbitales degenerados producirán la misma línea espectral, porque experimentan el mismo cambio de energía.

Sin embargo, en los alrededores del átomo puede existir una **dirección espacial** preferida. Por ejemplo, un electrón en un átomo sentirá el efecto de un campo magnético externo. La magnitud de este efecto dependerá de las $2\ell + 1$ posibles orientaciones del movimiento del electrón, dado por m_ℓ , y la intensidad del campo magnético, **B**, donde las unidades de **B** son en Tesla (T). A medida que el electrón se mueve a través del campo magnético, los orbitales **normalmente degenerados** adquieren energías ligeramente diferentes. Los electrones que hacen una transición entre estos orbitales anteriormente degenerados producirán así líneas espectrales con frecuencias ligeramente diferentes. La división de líneas espectrales en un campo magnético débil se denomina efecto Zeeman y se muestra en la Figura anterior izquierda. Las tres frecuencias de las líneas divididas en el caso más simple (llamado el efecto Zeeman normal) son:

$$v = v_0$$
 and $v_0 \pm \frac{eB}{4\pi \mu}$,

donde $\mathbf{v_0}$ es la frecuencia de la línea espectral en ausencia de un campo magnético y $\mathbf{\mu}$ es la masa reducida. Aunque los niveles de energía se dividen en $2\ell + 1$ componentes, las transiciones de los electrones que producen solo tres líneas espectrales con diferentes polarizaciones. Visto desde diferentes direcciones, puede suceder que no todas las tres líneas sean visibles. Por ejemplo, cuando la linea de vista es paralela al campo magnético (como cuando se mira hacia una mancha solar), la línea de frecuencia no desplazada $\mathbf{v_0}$ está ausente.

Por lo tanto, el efecto Zeeman les da a los astrónomos una herramienta de medir los campos magnéticos observados alrededor de manchas solares y en otras estrellas. Incluso si la división de la línea espectral es demasiado pequeña para ser detectada directamente, las diferentes polarizaciones a través de los componentes estrechamente espaciados aún se pueden medir y se puede deducir la intensidad del campo magnético.

Spin y el principio de exclusión de Pauli

Los intentos de comprender patrones más complicados de división de campo magnético (el efecto Zeeman anómalo), que generalmente implican un número de par de líneas espectrales espaciadas no uniformemente, llevaron a los físicos a descubrir en **1925** un **cuarto número cuántico**. Además de su movimiento orbital, el electrón posee un giro. Esta no es una rotación clásica, sino simplemente un efecto cuántico que dota al electrón de un momento angular de giro **S. S** es un vector de magnitud constante

$$S = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right)} \,\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \,\hbar,$$

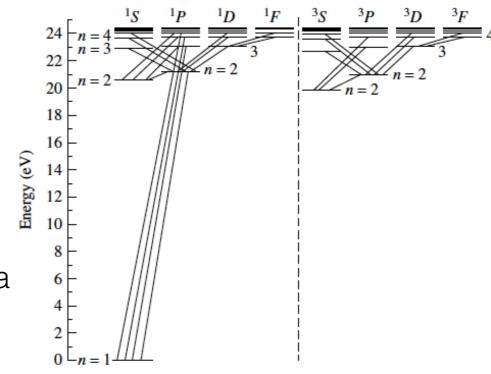
con un componente $S_z = m_s \hbar$. Los únicos valores del cuarto número cuántico, m_s , son $\pm 1/2$. Con cada orbital, o estado cuántico, etiquetados por cuatro números cuánticos, los físicos se preguntaron cómo muchos electrones en un átomo multielectrón podrían ocupar el mismo estado cuántico. La respuesta fue dada en 1925 por un físico teórico austriaco, Wolfgang Pauli (1900-1958): No hay dos electrones que puedan ocupar el mismo estado cuántico. El principio de exclusión de Pauli, que no dos electrones pueden compartir el mismo conjunto de cuatro números cuánticos, explica la estructura electrónica de los átomos, proporcionando así una explicación de las propiedades de la tabla periódica de los elementos. ¡Faltaba explicación teórica!

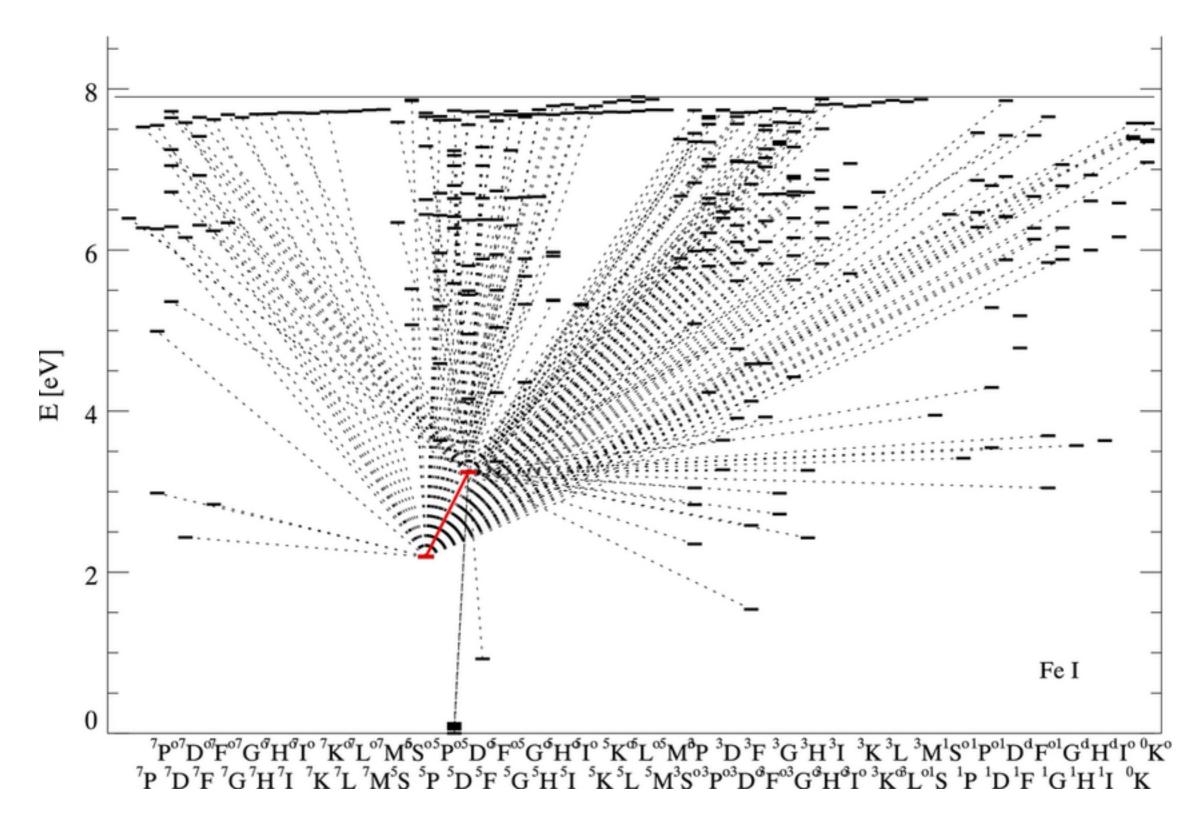
La síntesis final llegó en 1928 de un brillante físico teórico inglés, Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984) trabajando en Cambridge para combinar la ecuación de ondas de Schrödinger con la teoría de la relatividad especial de Einstein. Cuando finalmente logró escribir una ecuación de onda relativista para el electrón, se sorprendió al ver que la solución matemática incluía automáticamente el giro del electrón. También explicó y extendió el principio de exclusión de Pauli al dividir el mundo de las partículas en dos grupos fundamentales: **fermiones y bosones**. Los fermiones son partículas tales como electrones, protones y neutrones que tienen un spin de 1/2h (o un entero impar multiplicado por 1/2, como 3/2, 5/2, ...). Los **fermiones** obedecen el principio de exclusión de Pauli, por lo que no hay dos fermiones del mismo tipo que puedan tener el mismo conjunto de números cuánticos. El principio de exclusión de los **fermiones**, junto con la relación de incertidumbre de Heisenberg, explica la estructura de las enanas blancas y las estrellas de neutrones. **Bosones** son partículas como los **fotones** que tienen un giro integral de 0, 1h, 2h, 3h, Los bosones no obedecen el principio de exclusión de Pauli, por lo que cualquier número de bosones puede ocupar el mismo estado cuántico.

Como una ventaja final, la ecuación de Dirac predijo la existencia de antipartículas. La partícula y su antipartícula son idénticas, excepto por sus cargas eléctricas opuestas y sus momentos magnéticos. Pueden crearse pares de partículas y antipartículas a partir de la energía de los fotones de rayos gamma (según E = mc²). Por el contrario, los pares partícula-antipartícula pueden aniquilarse entre sí, con su masa convertida nuevamente en la energía de dos fotones de rayos gamma.

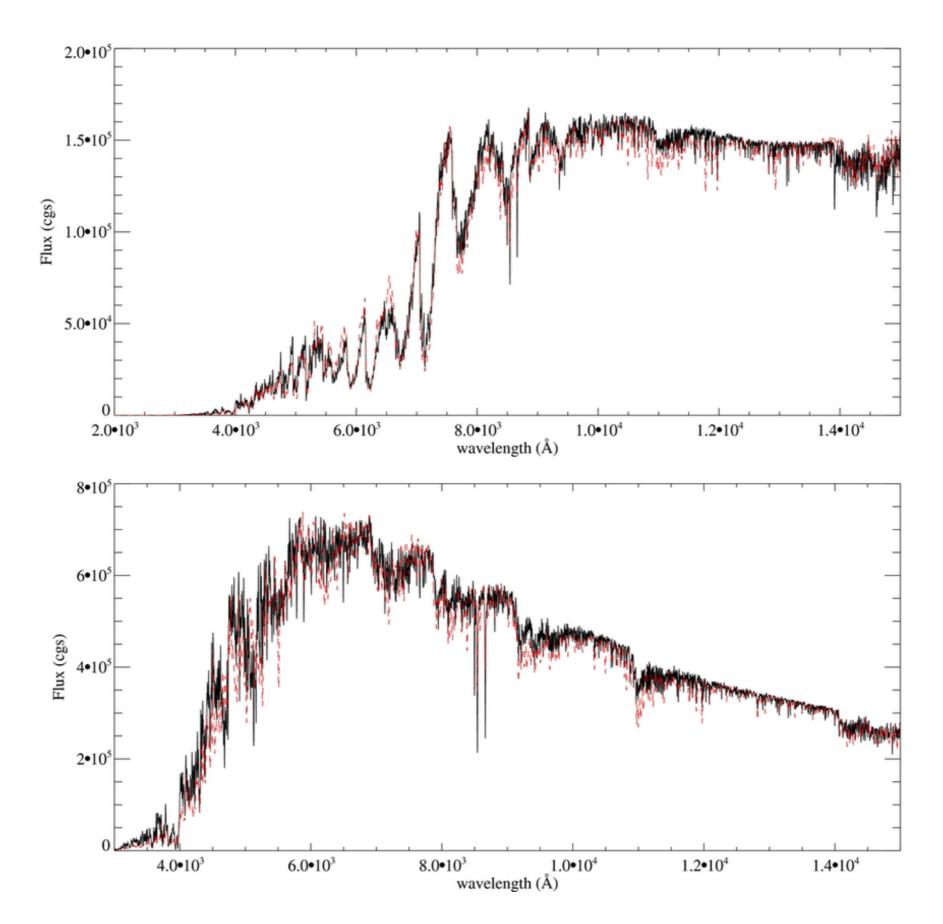
- La lista completa de cuatro números cuánticos (n, l, ml y ms) el número de niveles de energía posibles aumenta rápidamente con la cantidad de electrones.
- Complicaciones adicionales de los campos magnéticos externos y las interacciones electromagnéticas entre los propios electrones y entre los electrones y el núcleo. Los espectros pueden volverse muy complejos. La figura muestra algunos de los niveles de energía disponibles para los dos electrones en el átomo de helio neutro.
- ¡Imagine la complejidad del átomo de hierro relativamente abundante con sus 26 electrones!

Aunque existen niveles de energía para los electrones con varias combinaciones de números cuánticos, no siempre es fácil para un electrón hacer una transición de un estado cuántico con un conjunto específico de números cuánticos a otro estado cuántico. En particular, la naturaleza impone un conjunto de reglas de selección que restringen ciertas transiciones. Por ejemplo, una investigación cuidadosa de la figura mostrará que solo se muestran transiciones que implican " $\ell = \pm 1$ (de 1P a 1S, o de 1F a 1D, por ejemplo). Estas transiciones se conocen como *transiciones permitidas* y pueden ocurrir espontáneamente en escalas de tiempo de 10^{-8} s. Por otro lado, las transiciones que *no satisfacen el requisito de que "\ell = \pm 1 se conocen como transiciones prohibidas*. En el caso del efecto Zeeman solo podrían ocurrir tres transiciones entre los niveles de energía 1s y 2p (recuérdese la figura anterior). Esto se debe a otro conjunto de reglas de selección que requieren que " $m_{\ell} = 0$ o ± 1 y prohíban las transiciones entre orbitales si ambos orbitales tienen $m_{\ell} = 0$.





Modelo atómico non-LTE de Fe I. Los términos que conducen a las transiciones IR de banda J discutidas se resaltan en rojo. Solo las transiciones radiativas hacia y desde estos niveles se muestran en esta gráfica. Los cálculos utilizan un modelo mucho más complejo de Fe I con muchas más transiciones y simultáneamente también un modelo atómico detallado de Fe II que tampoco se muestra aquí.



Emergent fluxes computed with DETAIL (black, solid) as compared with the original SEDs from MARCS (red, dashed). Top: Teff = 3400 K and $\log g = 0$, [Z] =0. Bottom: Teff = 4400 K and $\log g = 0$, [Z] =0.