

Apuntes de mecánica cuántica 1

2023

Apuntes de las clases de *Mecánica Cuántica I* dadas por *María José Caturla* y transcritos a L^AT_EX por *Víctor Mira Ramírez* durante el curso 2023-2024 del grado en Física de la *Universidad de Alicante*.

Índice

Capítulo 1

Introducción _____ Página 3

- 1.1 Radiación de cuerpo negro 3
- 1.2 Efecto fotoeléctrico 4
- 1.3 Espectro de rayos X 4
- 1.4 Espectros atómicos 5

Capítulo 2

La ecuación de Schrödinger I _____ Página 7

Capítulo 3

La ecuación de Schrödinger II _____ Página 8

Capítulo 1

Introducción

1.1 Radiación de cuerpo negro

En el siglo XIX se buscaba el filamento que más radiación emitía (más luz), lo que propició el desarrollo de la física relacionada. Era posible medir ucar era el espectro de radiación de distintos cuerpos para estudiarlos. Aquí nace el concepto de cuerpo negro, un cuerpo que absorbe todas las radiaciones idílicamente. La emisión de radiación es una gráfica de energía frente a longitud de onda. Experimentalmente se obtuvieron dos leyes:

Definición 1.1.1: Ley de desplazamiento de Wien

La longitud de onda emitida depende de la temperatura del cuerpo emisor. A mayor temperatura, la longitud de onda emitida será menor (el pico). $\lambda_m \cdot T = B$ donde B es la *Constante de Wien* $B = 2,898 \times 10^{-3} m \cdot k$

Comentario:

Si $\lambda_m = 500$, ¿Cuál es la temperatura de la superficie del Sol? $T = 6000k$

Definición 1.1.2: Ley de Stefan-Boltzmann

$$P \propto T^4$$

Permite calcular la potencia irradiada en función de la temperatura.

Una manera de teorizar un cuerpo negro es considerando una esfera con un agujero muy pequeño. La luz que entra por un agujero se ve atrapada dentro, simulando un cuerpo negro. Cuando calcularon la densidad energética de este modelo, sucedía un problema: la **Catástrofe Ultravioleta**. El modelo no podía simular las longitudes de onda más pequeñas, la energía tendía a infinito con una asíntota vertical. Clásicamente se denomina a este modelo el modelo de Rayleigh-Jeans: $u(\lambda)d\lambda = 8\pi\lambda^{-4}KTd\lambda$.

Para resolver este problema, Max Planck tuvo un enfoque mucho más pragmático. Buscó una función que se aproximara a los datos experimentales para después deducir una posible teoría física de ahí. Él sabía que era necesario cambiar la constante de Boltzmann por otra que se acomodara mejor. Es en este punto donde introduce el concepto de la energía como cuantos. Nace aquí la famosa ecuación $\epsilon = h \cdot f$. Hoy en día ya le hemos puesto nombre a esta constante, la **Constante de Planck**. Como la energía es discreta, no se puede usar una integral, debemos hacer uso de sumatorios, lo cual resuelve la catástrofe.

El enfoque cuántico de Planck: $u(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi\lambda^{-5}hc}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1}d\lambda$.

Planck no se contentó con esta explicación teórica y dedicó su vida a tratar de buscar teorías alternativas. La constante de Planck es: $h = 6,626 \times 10^{-34} J \cdot s$. El hecho de que la constante sea tan pequeña explica porqué a nivel macroscópico no observamos fenómenos cuánticos.

1.2 Efecto fotoeléctrico

El primero en observar este fenómeno fue Hertz, mientras realizaba un experimento en el que trataba de probar que la luz era una onda. En dicho experimento, encontró un fenómeno que parecía demostrar lo contrario, que la luz se comportaba como una partícula: el efecto fotoeléctrico. Es remarcable el hecho de que Hertz publicara sus resultados a pesar de ser contradictorios.

El efecto fotoeléctrico se basa en que al irradiar con una onda electromagnética un metal se emiten electrones (o fotoelectrones) en algunas condiciones concretas. Al conectar un ánodo con una diferencia de potencial cercano al metal que irradiamos, observamos una corriente eléctrica generada, positiva si colocamos un potencial positivo, y al ir reduciendo el potencial llegamos a un potencial límite donde deja de haber corriente eléctrica, el llamado **Potencial de frenado** (V_0). La frecuencia de la luz incidente es directamente proporcional con la intensidad de corriente.

Teorema 1.2.1 Problemas clásicos del efecto fotoeléctrico

1. No se entendía cómo el potencial de frenado es independiente de la intensidad de la luz.
2. Tampoco podía explicarse clásicamente cómo la emisión de los electrones no sucedía para cualquier longitud de onda, independientemente de la intensidad. Llamamos a la frecuencia por debajo de la cual no se producen fotoelectrones **frecuencia umbral**.
3. Por último, la ausencia de tiempo de retardo entre la llegada de la radiación al metal y la producción de fotoelectrones era inexplicable también.

Fue Einstein quien resolvió este problema, basándose en la teoría de Planck. Einstein postuló que para poder empezar a arrancar electrones de un metal, debíamos superar una función de trabajo Φ dependiente del metal y del tratamiento de su superficie. El rigor en los experimentos era imprescindible para mantener una coherencia en los resultados.

La energía incidente era proporcional a la constante de Planck multiplicado por la frecuencia, hf . La energía cinética que tendrán los electrones emitidos será hf menos la función de trabajo: $E_c = hf - \Phi$ y como $E_c = e|V_0|$, entonces $e|V_0| = hf - \Phi$. La frecuencia umbral será cuando la energía incidente sea exactamente igual a la función de trabajo, pudiendo despejar la frecuencia umbral $hf_u = \frac{\Phi}{h}$.

1.3 Espectro de rayos X

Fueron descubiertos también en el siglo XIX de forma accidental mientras estudiaba rayos catódicos. Se dio cuenta que al hacer incidir electrones sobre un material, aparecía una radiación que no supo describir, y la bautizó como **Rayos X**. Se observó como estos rayos atravesaban materiales en mayor o menor grado en función de su densidad.

No se entendían los picos de la gráfica, así como la aparición de una frecuencia umbral. Fue Einstein quien se dio cuenta de la similitud de esta gráfica con la del efecto fotoeléctrico. Al acelerar electrones, obtenemos una radiación asociada, siguiendo la ecuación anterior: $e|V_0| = hf - \Phi$.

Definición 1.3.1: Ley de Duane-Hunt

Longitud de onda mínima a partir de la cuál aparece una radiación X asociada:

$$\lambda_m = \frac{1,24 \times 10^3}{V} m$$

Suponiendo: $e|V_0| \geq \Phi$ $e|V_0| = hf$ $c = \lambda f$

1.4 Espectros atómicos

Se aplicaba a ciertos gases un voltaje para que emitiesen luz. No se veía todo el espectro, sino solo líneas discretas (luz de forma no continua sino discreta). Estos eran los espectros de emisión, también en espectros de absorción: luz blanca impacta en un material y al reflejarse (según el material) faltaban ciertas líneas que correspondían a lo que absorbía y reflejaba el material.

Para cada material se tienen determinadas longitudes de onda. En el estudio de esta sucesión de longitudes de onda se llega a la siguiente expresión que puede describir de forma empírica la posición de dichas líneas: (Por ejemplo la serie del hidrógeno sólo tenía 4 líneas).

Definición 1.4.1: Ecuación de Balmer

$$\lambda_m = \frac{m^2}{m^2 - 4} \cdot 364,6 nm$$

Donde m es un entero. Sea $m = 3, 4, 5, 6 \dots$ esto funcionaba fenomenal. No sólo daba las líneas ya conocidas, sino que predecía las que se descubrieron posteriormente.

De forma paralela se consigue otra expresión válida para elementos alcalinos:

Definición 1.4.2: Ecuación de Rydberg-Ritz

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n > m \quad n, m = 1, 2, 3 \dots$$

Donde R es la **Constante de Rydberg**, casi independiente del material. ($R_H = 1,096776 \cdot 10^7 m^{-1}$, $R > mf = 1,097373 \cdot 10^7 m^{-1}$)

Esto funciona con el hidrógeno: el espectro es visible, pero además también puede predecir las líneas espectrales que se hallan en el espectro no visible (infrarrojos, UV). La ecuación de Balmer se puede deducir a partir de esta.

Todo esto lleva a que Bohr desarrolle su teoría atómica, pero había dos problemas:

- El momento angular de los electrones de las órbitas había de estar cuantizado.
- Al estar el electrón orbitando alrededor de una carga, se pierde energía, cayendo en espiral y chocando contra el núcleo.

Teorema 1.4.1 Postulados del Modelo atómico de Bohr

1. Los electrones orbitan alrededor del núcleo en estados estacionarios donde no se emite radiación (no siguiendo la mecánica clásica), es decir, son estables.
2. La diferencia de energía entre niveles será aquella de la radiación que se emita.
3. El momento angular del electrón está cuantizado. Consecuentemente, la energía de los estados está cuantizada.

A consecuencia de la cuantización de los radios vamos a demostrar la cuantización de la energía de los electrones $E_c = K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m \left(\frac{kze^2}{mr} \right) = \frac{1}{2} \frac{kze^2}{r} = -\frac{1}{2}u \implies E = U + E_c = U - \frac{1}{2}U = \frac{1}{2}U = -\frac{1}{2} \frac{kze^2}{r}$ De aquí obtenemos una ecuación para la energía en función de n :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{kze^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{mk^2e^4}{\hbar^2} \frac{z^2}{n^2}$$

Si llamamos E_0 a $-\frac{1}{2} \frac{kze^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{mk^2e^4}{\hbar^2}$, entonces obtenemos que $E_n = -E_0 \frac{z^2}{n^2}$ y como $h\nu = E_i - E_j \implies h\nu =$

$-E_0 \frac{z^2}{n_i^2} + E_0 \frac{z^2}{n_f^2} = E_0 z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{E_0 z^2}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$ notando que $R_H = \frac{E_0}{hc}$ es la constante de Raylberg. Esto validó el postulado de Bohr

Capítulo 2

La ecuación de Schrödinger I

Capítulo 3

La ecuación de Schrödinger II