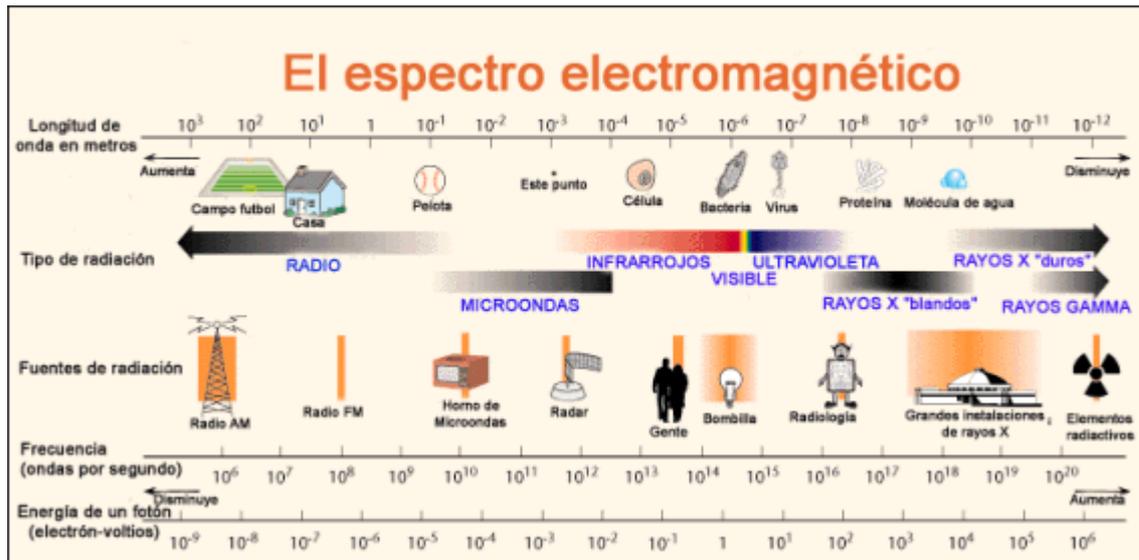


## Tema 3: Fundamentos de Física cuántica

### 1- Introducción.

Los distintos tipos de ondas electromagnéticas se clasifican en función de su longitud de onda, su frecuencia, su energía, etc., en el denominado *espectro electromagnético*. Como es bien sabido, la relación entre la frecuencia ( $\nu$ ) y la longitud de onda ( $\lambda$ ) es  $\nu = c/\lambda$ , donde  $c$  es la velocidad de la luz.



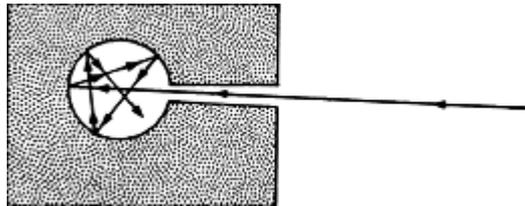
\* Espectro electromagnético

### 2- Radiación térmica.

Se llama radiación térmica a la radiación (electromagnética) emitida por un cuerpo como consecuencia de su temperatura. Todos los cuerpos por encima de 0 K emiten esta radiación y absorben del entorno circundante hasta que las temperaturas de ambas se igualan y entonces la velocidad de absorción y emisión coinciden (no son nulas, sino que son iguales, por eso el intercambio neto es cero).

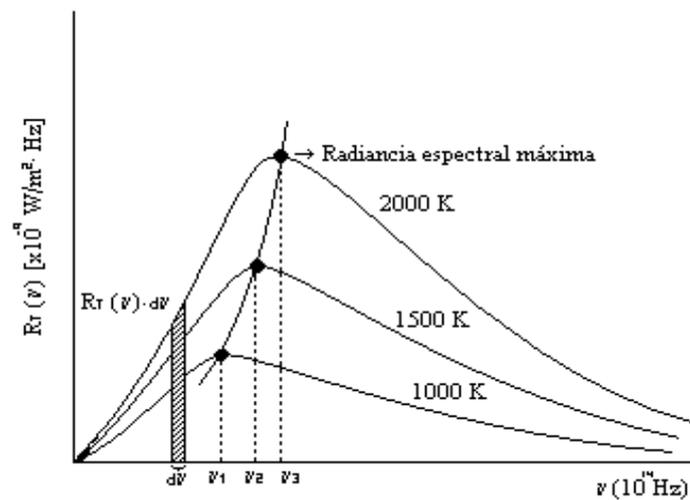
La materia en estado condensado (sólido o líquido) emite un espectro de radiación continuo. La forma detallada del espectro de radiación depende de la composición del mismo. Sin embargo, experimentalmente se encuentra que hay una clase de cuerpos que emiten espectros térmicos de características universales. Son los llamados *cuerpos negros*, es decir, cuerpos cuya superficie absorbe toda la radiación térmica que incide sobre ellos. Puesto que no reflejan luz, se ven negros, de ahí su nombre. Cualquier objeto recubierto con una capa de pintura negra sería asimilable a un cuerpo negro. Todos los cuerpos negros a la misma temperatura emiten radiación con el mismo espectro independientemente de su composición.

Un ejemplo algo distinto de cuerpo negro sería una cavidad con un pequeño orificio. Esto es así porque la radiación exterior que incide sobre el agujero penetra en la cavidad y se refleja múltiples veces en el interior de la cavidad de forma que la probabilidad de que salga por el agujero es muy reducida y finalmente será absorbido por las paredes (el área del orificio debe ser pequeña en comparación con el área interior de la cavidad).



\* Una cavidad como cuerpo negro

La distribución espectral de la radiación de un cuerpo negro se puede especificar por la cantidad  $R_T(\nu)$  denominada *radiancia espectral* y definida de forma que  $R_T(\nu)d\nu$  es la energía emitida con frecuencias comprendidas entre  $\nu$  y  $\nu + d\nu$  por unidad de área y unidad de tiempo a la temperatura T. Las curvas de radiancia espectral tienen la forma que se indica en la figura.



\* Radiación de un cuerpo negro a distintas temperaturas

Algunas consecuencias de las curvas de radiancia que se deducen de la figura son:

- La potencia emitida en un intervalo de frecuencias  $d\nu$  es pequeña si esa frecuencia es pequeña ( $\nu \ll 10^{14}$ ). La potencia es nula si  $\nu = 0$ .

- La potencia radiada en el intervalo  $d\nu$  aumenta rápidamente al aumentar  $\nu$  y alcanza un máximo (para  $T = 1000\text{ K}$  el máximo se alcanza a  $\nu \approx 1.1 \cdot 10^{14}\text{ Hz}$ ). Por encima de la frecuencia del máximo la potencia radiada disminuye lenta pero continuamente conforme aumenta la frecuencia. Se vuelve a hacer nulo para valores de frecuencia suficientemente grandes ( $\nu \rightarrow \infty$ ).
- La frecuencia para la que la potencia radiada es máxima aumenta conforme aumenta la temperatura. Este aumento es lineal ( $\nu_{\max} \propto T$ ).
- La potencia total radiada en todas las frecuencias a una temperatura dada se denomina *radiancia* y se calcula como  $R_T = \int_0^{\infty} R_T(\nu) d\nu$ . Ésta corresponde al área bajo la curva de la temperatura que se considere.

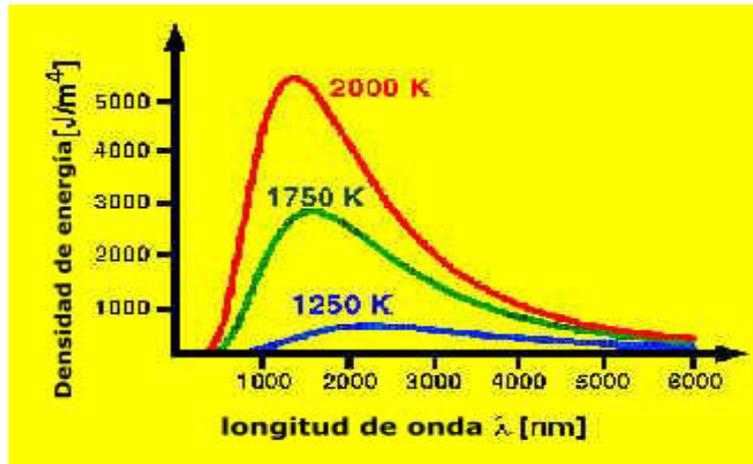
La potencia total radiada aumenta muy rápidamente al aumentar la temperatura, concretamente lo hace según la *ley de Stefan-Boltzmann*

$$R_T = \sigma \cdot T^4 \text{ donde } \sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4} \text{ es la constante de Stefan-Boltzmann.}$$

Como la frecuencia a la que se radia la máxima potencia es proporcional a la temperatura y la frecuencia y la longitud de onda son inversas, se cumplirá  $\lambda_{\max} \cdot T = \text{cte}$  (*Ley de desplazamiento de Wien*) donde la constante vale  $2.898 \cdot 10^{-3} \text{ mK}$ .

**Nota:** La Ley de desplazamiento de Wien establece que  $\lambda_{\max} \cdot T = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ mK}$ . Si queremos calcular la frecuencia del máximo de longitud, calculamos  $\lambda_{\max}$  y luego aplicamos  $\lambda_{\max} = c/\nu$ . Pero no es válido decir  $\nu_{\max} = c/\lambda_{\max}$ . Es decir, el máximo de frecuencia no es la frecuencia correspondiente al máximo de longitud. Recíprocamente, si aplicamos  $\nu_{\max} = \text{cte} \cdot T$  (donde la constante es diferente a la anterior,  $\text{cte} = 5.88 \cdot 10^{10} \text{ Hz/K}$ ), obtenemos la frecuencia del máximo, pero no se corresponde a  $\lambda_{\max} = c/\nu_{\max}$ .

En la siguiente gráfica, en la que se representa la radiancia en función de la longitud de onda se puede comprobar lo anterior.



\* Radiación de un cuerpo negro en función de la longitud de onda.

Al igual que  $R_T(\nu)d\nu$  expresa la energía emitida con frecuencias comprendidas entre  $\nu$  y  $\nu + d\nu$  por unidad de área y tiempo, también es frecuente utilizar  $\rho_T(\nu)d\nu$  que es la energía emitida con frecuencias entre  $\nu$  y  $\nu + d\nu$  por unidad de volumen. Ambas se relacionan según

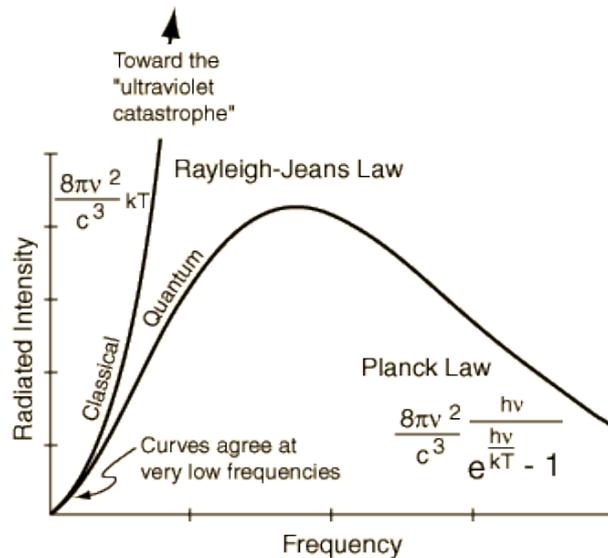
$$R_T(\nu) \cdot d\nu = \frac{c}{4} \rho_T(\nu) \cdot d\nu .$$

### 3- Teorías sobre los espectros de radiación.

Rayleigh y Jeans, utilizando consideraciones clásicas, a principios del s. XX, encontraron la siguiente función para la densidad de radiación

$$\rho_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3} d\nu$$

Para llegar a este resultado, Rayleigh y Jeans evaluaron el número de ondas electromagnéticas que podían ser estacionarias en el interior de la cavidad radiante y, según la teoría clásica de equipartición, atribuyó a cada una de esas ondas estacionarias una energía dada por  $\bar{\varepsilon} = k \cdot T$  donde  $k$  es la denominada *constante de Boltzmann*,  $k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ . Pero comparando los resultados teóricos con los experimentales, se encontró un profundo desacuerdo sobre todo a frecuencias elevadas. Es lo que se denomina *catástrofe ultravioleta*.



\* Curvas teórica y experimental. Ley de Rayleigh-Jeans.

Tratando de resolver la discrepancia encontrada, Max Planck llegó a considerar la posibilidad de que se violara la ley de equipartición  $\bar{\varepsilon} = k \cdot T$  que conducía al resultado anterior.

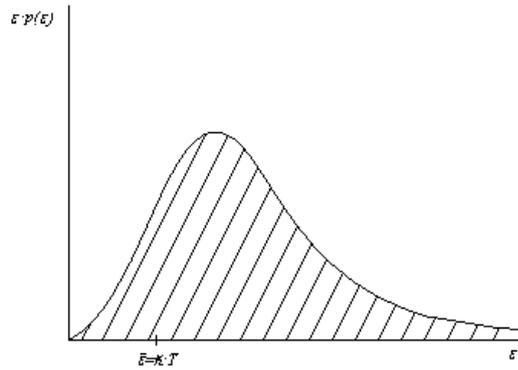
Planck pensó que para reproducir los resultados experimentales debía cumplirse:

- $\bar{\varepsilon} \rightarrow k \cdot T$  cuando  $\nu \rightarrow 0$  porque a baja frecuencia el resultado clásico coincide con los experimentos.
- $\bar{\varepsilon} \rightarrow 0$  cuando  $\nu \rightarrow \infty$  porque para  $\nu \rightarrow \infty$  la curva experimental tiende a cero.

Es decir, Planck dedujo que, a diferencia de la teoría clásica que atribuía un valor a la energía media  $\bar{\varepsilon}$  independientemente de la frecuencia, debe existir una relación entre la energía media y la frecuencia,  $\bar{\varepsilon} = \varepsilon(\nu)$ .

Pero para poder cumplir las condiciones asintóticas anteriores, Planck necesitó además suponer que la energía sólo podía tomar una serie de valores discretos, no podía variar de forma continua. Para llegar a ese resultado, procedió de la siguiente manera: para calcular  $\bar{\varepsilon}$  hay que evaluar el producto de la energía por la probabilidad de que el ente tenga esa energía, es decir,  $\varepsilon \cdot P(\varepsilon)$ . Las curvas de esta función son de la forma indicada en la figura adjunta. El área bajo esta curva proporciona el valor medio:

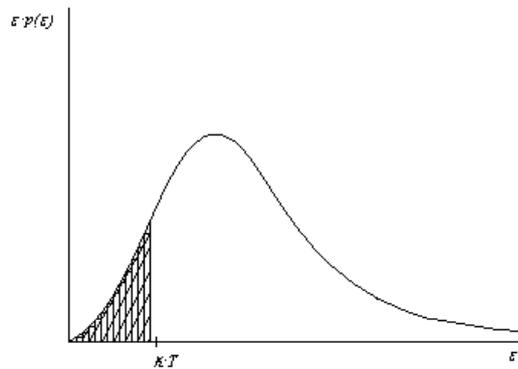
$$\bar{\varepsilon} = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon \cdot P(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} P(\varepsilon) d\varepsilon}$$



\* Curva de la función  $\varepsilon \cdot P(\varepsilon)$ . El área encerrada representa el valor medio de la energía

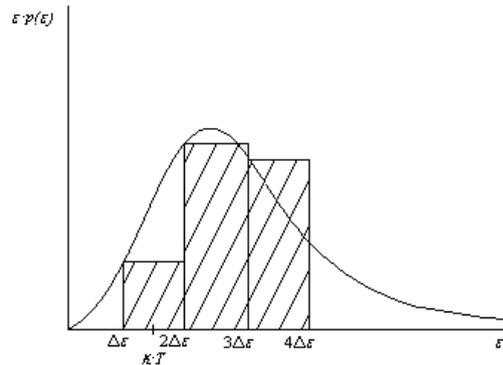
Si la energía toma cualquier valor se obtiene el resultado clásico  $\bar{\varepsilon} = k \cdot T$ . Pero veamos lo que pasa si la energía toma valores discretos uniformemente separados distintos intervalos:

- a) Si  $\Delta\varepsilon$  es mucho menor que  $k \cdot T$  ( $\Delta\varepsilon \ll k \cdot T$ ), los valores de energía están tan próximos que el resultado de sumar las áreas de todos los rectángulos es casi idéntico a considerar que  $\varepsilon$  es continua.



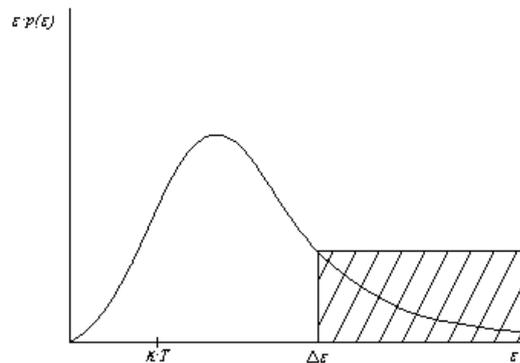
\* Cálculo de la energía media en el caso  $\Delta\varepsilon \ll k \cdot T$ .

- b) Si  $\Delta\varepsilon$  es del orden de  $k \cdot T$ , el valor de  $\bar{\varepsilon}$  al sumar de forma discreta los rectángulos sobre la figura es menor que  $k \cdot T$  (queda área sin sumar).



\* Cálculo de la energía media en el caso  $\Delta\varepsilon \approx kT$ .

- c) Si  $\Delta\varepsilon$  es mucho mayor que  $kT$  ( $\Delta\varepsilon \gg kT$ ), el área bajo la curva es prácticamente nula. Es decir, se ha conseguido el requisito  $\bar{\varepsilon} \rightarrow 0$ .



\* Cálculo de la energía media en el caso  $\Delta\varepsilon \gg kT$ .

Para que todo sea consistente, es necesario que  $\Delta\varepsilon$  sea una función creciente con  $\nu$ , es decir, a frecuencias pequeñas  $\Delta\varepsilon \rightarrow 0$  y se recupera el resultado clásico. Pero a frecuencias altas  $\Delta\varepsilon$  se hace mayor y se obtiene el caso c), es decir,  $\bar{\varepsilon} \rightarrow 0$ , como se requería. Planck pensó que la relación de  $\Delta\varepsilon$  con  $\nu$  podía ser lo más sencilla posible ( $\Delta\varepsilon = h\nu$ ) y estableció su postulado de cuantización:

Cualquier ente físico con un grado de libertad cuya coordenada (longitud de un resorte, amplitud de una onda, etc...) sea una función senoidal del tiempo, es decir, realice oscilaciones armónico simples, sólo puede poseer energías totales dadas por  $\varepsilon = n \cdot h \cdot \nu$  ( $n=0,1,2,\dots$ )

donde  $\nu$  es la frecuencia de la oscilación y  $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$  la constante de Planck. Este efecto de cuantización sólo se “aprecia” en sistemas tales que  $\varepsilon \approx h\nu$ . Por ejemplo, en un péndulo simple, que realiza oscilaciones armónico simples y estaría sujeto al principio de cuantización, no puede apreciarse porque sus valores de energía son mucho mayores que  $h\nu$ .

Con esta nueva expresión para la energía, se puede obtener

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon \cdot p(\varepsilon)}{\sum_{n=0}^{\infty} p(\varepsilon)} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Y, finalmente

$$\rho_T(\nu) \cdot d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu$$

que al representarse gráficamente está en acuerdo con los resultados experimentales.

#### 4- Algunas consecuencias de la Ley de Radiación de Planck.

La *Ley de Radiación de Planck* puede expresarse tanto en términos de la frecuencia como de la longitud de onda. Como  $\rho_T(\lambda) \cdot d\lambda = -\rho_T(\nu) \cdot d\nu$  (el signo negativo hace referencia a que al aumentar  $\nu$  disminuye  $\lambda$  y viceversa), se tendrá

$$\rho_T(\lambda) = -\rho_T(\nu) \frac{d\nu}{d\lambda} = \rho_T(\nu) \cdot \frac{c}{\lambda^2}$$

es decir,

$$\rho_T(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \cdot \frac{d\lambda}{e^{hc/\lambda \cdot kT} - 1}$$

A partir de la ley de Planck se puede derivar la ley de Stefan-Boltzmann

$$R_T(\nu) \cdot d\nu = \frac{c}{4} \rho_T(\nu) \cdot d\nu \rightarrow R_T = \int_0^{\infty} R_T(\nu) \cdot d\nu = \sigma \cdot T^4$$

donde  $\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3}$

La *Ley de Desplazamiento de Wien* puede también obtenerse de la ley de Plank según:

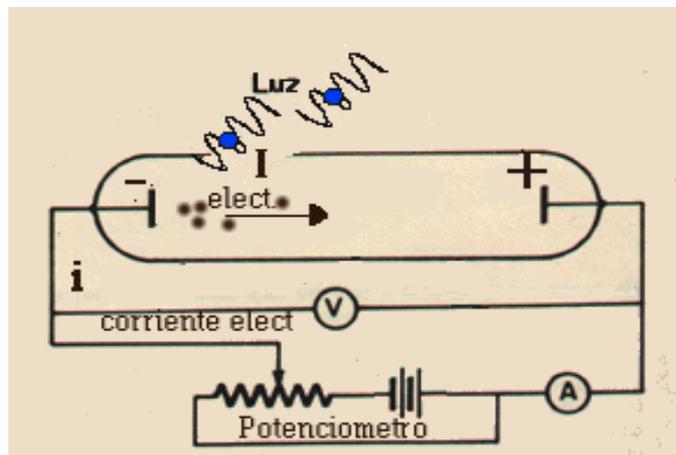
$$\frac{d\rho_T(\nu)}{d\nu} = 0, \quad \text{o bien} \quad \frac{d\rho_T(\lambda)}{d\lambda} = 0$$

para obtener  $\nu_{\max}$  o  $\lambda_{\max}$  respectivamente.

## 5- El efecto fotoeléctrico.

Los experimentos que confirmaron por primera vez la existencia de ondas electromagnéticas y la teoría electromagnética de Maxwell fueron realizados por Hertz en 1886 – 1887. Precisamente, realizando estos experimentos, se encontró un fenómeno nuevo que sería empleado más tarde para rebatir las teorías ondulatorias. El fenómeno consiste en que al iluminar un electrodo con luz ultravioleta se facilita la descarga eléctrica al liberarse electrones. En general, a la emisión de electrones desde una superficie por acción de la luz se le denomina *efecto fotoeléctrico*.

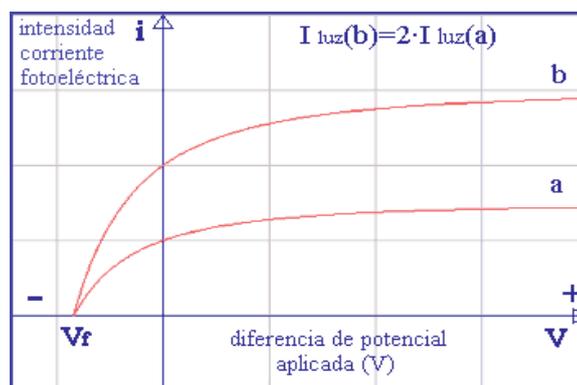
La siguiente figura ilustra un dispositivo experimental para estudiar el efecto fotoeléctrico.



\* Emisión de electrones a partir de fotones. Efecto fotoeléctrico

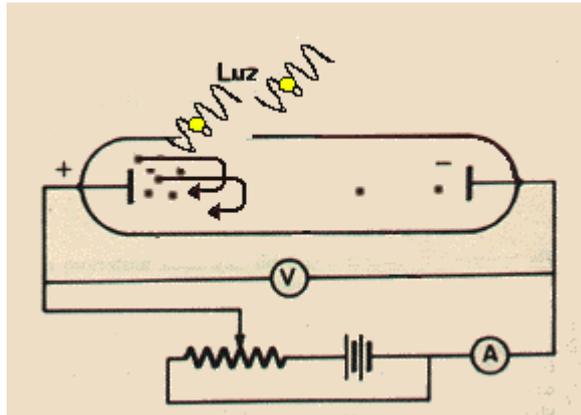
Inicialmente la luz incidente, que es monocromática (de una longitud de onda definida), incide sobre el electrodo negativo (cátodo) y libera electrones que, al ser atraídos por el electrodo positivo (ánodo) gracias a la diferencia de potencial existente  $V$ , se detectan como una corriente eléctrica por el amperímetro.

La siguiente figura representa la corriente en función de la diferencia de potencial aplicada.



Si la diferencia de potencial es suficientemente elevada, todos los electrones emitidos desde el cátodo se recogen en el ánodo y por eso la corriente alcanza un valor de saturación.

Si se invierte el signo de  $V$ , la corriente no cesa inmediatamente. Para  $V=0$  se sigue observando paso de corriente y con potenciales negativos (electrones frenados por el campo eléctrico). Se observa corriente hasta que  $V = -V_0$  para el que ya no se detecta ésta.  $V_0$  se denomina *potencial de frenado*.



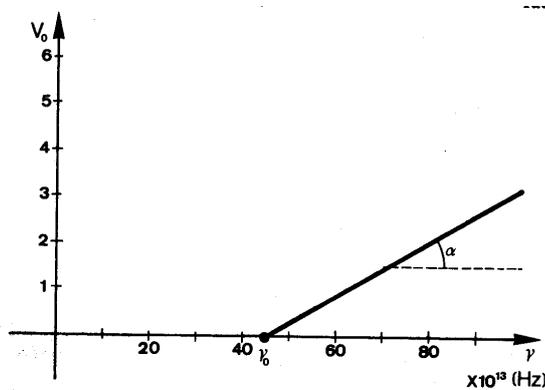
\* Proyección de electrones con potencial invertido.

Para que los electrones alcancen el ánodo aun frenados por el potencial, tienen que ser emitidos con una cierta energía cinética. La máxima energía cinética será la correspondiente al potencial de frenado multiplicada por la carga del electrón.

$$K_{\max} = e \cdot V_0$$

Se observa en la gráfica que este valor es independiente de la intensidad de la radiación (pues es el mismo valor para “a” y “b”).

Continuando con los experimentos, se observa que el potencial de frenado depende de la frecuencia de la luz que se hace incidir sobre el cátodo de forma lineal.



\* Relación del potencial de frenado con la frecuencia.

Además, se observa que por debajo de una cierta frecuencia, denominada *frecuencia de corte*, no sucede el efecto fotoeléctrico. La mayor parte de los experimentos mostrados fueron realizados por Millikan quien, debido a su esmerado trabajo, se hizo acreedor al premio Nóbel en 1923. Ahora es el momento de explicar el efecto fotoeléctrico con la teoría vigente hasta el momento, es decir, la teoría ondulatoria. Pero existen 3 hechos que no pueden explicarse en base a esa teoría:

- a) La energía cinética de los electrones debería aumentar conforme aumenta la intensidad de la iluminación. Esto se deduce de que la fuerza aplicada al electrón (que le suministra energía cinética) debe ser  $e \cdot E$  y, según la teoría ondulatoria, la amplitud de  $E$  es creciente con la intensidad; pero lo que se observa es que  $K$  (en particular  $K_{\max}$ ) es independiente de la intensidad.
- b) Según la teoría ondulatoria, como la energía depende de la intensidad, se podría conseguir, aumentando dicha intensidad, que el efecto fotoeléctrico se diera para cualquier frecuencia. Sin embargo, hemos visto cómo existe una frecuencia umbral o frecuencia de corte por debajo de la cual no se detecta el efecto fotoeléctrico.
- c) Según la teoría ondulatoria, como la energía luminosa se encuentra uniformemente distribuida en el frente de la onda, si la luz es suficientemente débil, debe existir un cierto tiempo de retraso durante el cual el electrón debe estar acumulando la energía necesaria para escapar del electrodo. Pues bien, nunca se ha medido retraso alguno en la emisión de fotoelectrones.

En 1905, Einstein, tomando como punto de partida las hipótesis de cuantización de la energía de Planck, propuso que la energía radiante estaba cuantizada en paquetes concentrados a los que llamó *fotones* y que tienen la mínima cantidad posible de energía, es decir  $E = h \nu$ . Ciertamente que los fotones al propagarse no lo hacen como partículas clásicas, sino como ondas; pero en las palabras de Einstein, “los experimentos que ponen de manifiesto la teoría ondulatoria no pueden manifestar la naturaleza corpuscular, igual que un chorro de agua no evidencia la presencia de gotas individuales”.

Einstein centró su atención en los procesos de emisión y absorción de la luz (fotones) para dar la siguiente explicación sobre el efecto fotoeléctrico:

- Como los fotones son paquetes concentrados de energía, un fotón cede completamente su energía a un sólo electrón.

- Cuando se emite un electrón desde la superficie de un metal, su energía cinética es  $K = h\nu - W$ , donde  $h\nu$  es la energía del fotón incidente absorbido y  $W$  el trabajo necesario para extraer el electrón del metal. En el caso de que el electrón sea el más débilmente ligado, saldrá con la máxima energía cinética y el trabajo será el menor de todos:

$$K_{\max} = h\nu - W_0,$$

donde  $W_0$  se denomina *función trabajo* (que es característico de cada material) y es la energía (trabajo) mínima necesaria para extraer un electrón del metal. Recordando que  $K_{\max} = eV_0$ , esta última ecuación se puede reescribir como  $eV_0 = h\nu - W_0$  o bien

$$V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{W_0}{e}$$

Ahora se comprobará como esta nueva teoría resuelve los 3 inconvenientes que no resolvía la teoría electromagnética:

- Como  $K_{\max} = h\nu - W_0$  sólo debe depender del material ( $W_0$ ) y de la frecuencia de la radiación, no debe esperarse que al aumentar de intensidad (número de fotones), se altere  $K_{\max}$ .
- Si  $K_{\max} = 0$ , es decir,  $h\nu = W_0$ , la radiación no consigue dotar a los electrones de ninguna energía cinética y no tendrá lugar el efecto fotoeléctrico. Por tanto, para  $\nu < \nu_0 = W_0/h$  no se presentará el efecto fotoeléctrico por más intensa que sea la radiación (es decir, independientemente del número de fotones).
- Como el fotón transporta la energía en paquetes concentrados (no repartida en un área), no es necesario esperar ningún tiempo entre la iluminación y la emisión.

Adicionalmente, la ecuación

$$V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{W_0}{e}$$

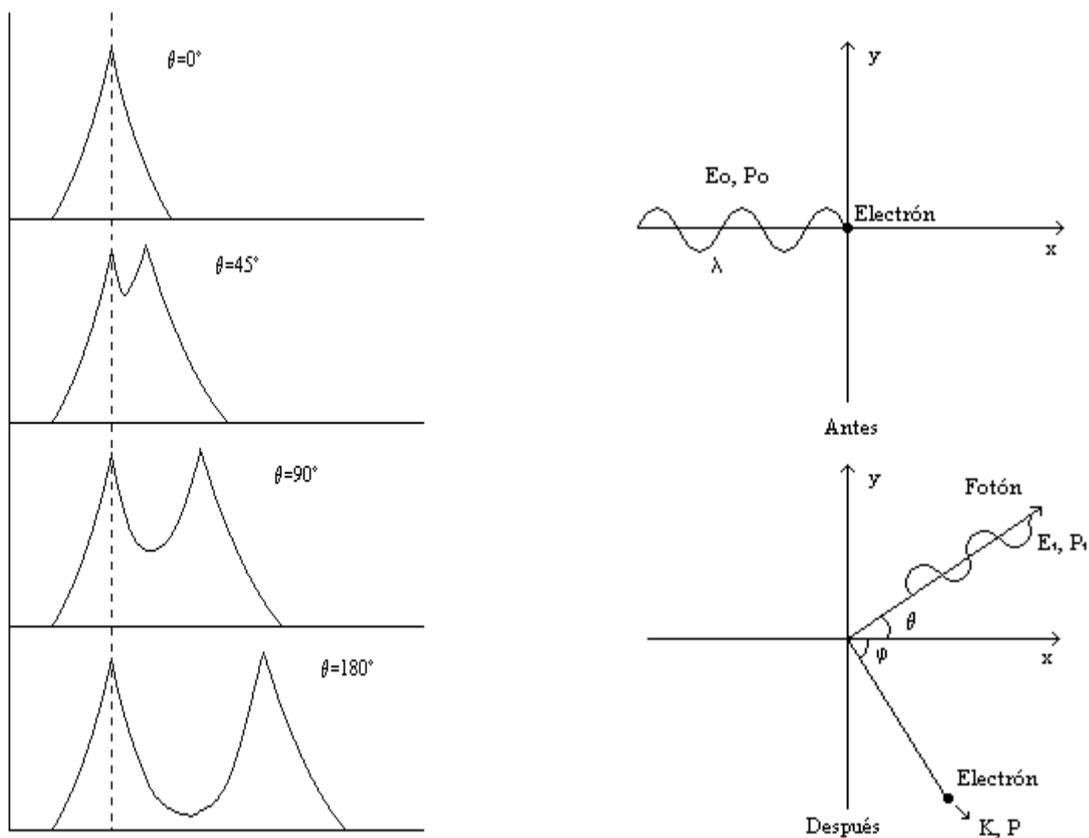
predice una relación lineal entre  $V_0$  y  $\nu$  que es la que se encontró en los experimentos de Millikan. Además, la pendiente de la curva debe ser  $h/e$  lo que permite calcular la constante de Planck. El hecho de que el valor encontrado coincidiera con el que obtuvo Planck a partir de su ley de radiación supuso un fuerte espaldarazo a la visión corpuscular de la radiación.

En la actualidad, la hipótesis del fotón se usa en todo el espectro electromagnético, no sólo la luz visible, y el hecho de que la radiación electromagnética se presente bajo una doble

perspectiva es algo aceptado, cuanto más con el auge de la mecánica cuántica que amplía esta dualidad no sólo a la radiación electromagnética sino a cualquier ente material, como más adelante se verá.

## 6- El efecto Compton.

En el año 1923, la naturaleza corpuscular de la radiación recibió un nuevo impulso con el denominado *efecto Compton*. Compton hizo incidir en sus experimentos un haz de rayos X de longitud de onda  $\lambda$  definida sobre un blanco de grafito. Para los distintos ángulos de dispersión medía la intensidad de los rayos X en función de la longitud de onda. Si bien los rayos X incidentes presentan una sola longitud de onda, los rayos dispersados presentan máximos en dos longitudes de onda: una coincide con la incidente y la otra,  $\lambda'$ , se encuentra desplazada una cantidad  $\Delta\lambda$ .



\* Esquemas de los experimentos del efecto Compton

La presencia de un corrimiento en la longitud de onda dispersada no es posible justificarla si se consideran los rayos X como una onda electromagnética clásica. En el modelo clásico, el vector oscilante del campo eléctrico de la onda incidente, de frecuencia  $\nu$ , pone a

oscilar los electrones libres del blanco con la misma frecuencia  $\nu$ . Estos electrones oscilantes radian ondas electromagnéticas de la misma frecuencia  $\nu$ , por lo que el corrimiento Compton no debería aparecer.

En cambio, Compton interpretó su resultado experimental postulando el haz de rayos X incidente como un paquete de fotones cada uno con energía  $E = h\nu$ . Esos fotones, al chocar con los electrones libres del blanco, transfieren algo de energía al electrón, por lo que el fotón dispersado tendrá algo menos de energía (es decir, una frecuencia menor, y en consecuencia una longitud de onda mayor). Así se justificaría cualitativamente el corrimiento Compton.

El hecho de suponer que los electrones sean libres quiere decir que la energía de los rayos X incidentes es mucho mayor que su energía de ligadura. En estas condiciones podemos encontrar una expresión cuantitativa para el efecto Compton considerando un choque elástico entre un fotón y un electrón. Como el fotón se mueve a la velocidad de la luz, el tratamiento debe ser obviamente relativista.

Consideremos un fotón incidente de energía total  $E_0$  y cantidad de movimiento

$$p_0 = \frac{E_0}{c} = \frac{h\nu_0}{c} = \frac{h}{\lambda_0}$$

que choca contra un electrón inicialmente en reposo. El fotón sale dispersado con energía  $E_1$  y cantidad de movimiento  $p_1$ , y el electrón adquiere una energía cinética  $K$  y un movimiento lineal  $p$ . Planteando la conservación de la cantidad de movimiento, se obtiene:

$$p_0 = p_1 \cos \theta + p \cos \varphi \quad (1)$$

$$p_1 \sin \theta = p \sin \varphi \quad (2)$$

Y, planteando la conservación de la energía total

$$E_0 + m_0 c^2 = E_1 + K + m_0 c^2 \quad (3)$$

Elevando al cuadrado (1) y (2) y sumando se obtiene:

$$\left. \begin{aligned} (p_0 - p_1 \cos \theta)^2 &= p^2 \cos^2 \varphi \\ p_1^2 \sin^2 \theta &= p^2 \sin^2 \varphi \end{aligned} \right\} \rightarrow p_0^2 + p_1^2 - 2 \cdot p_0 p_1 \cos \theta = p^2 \quad (4)$$

A partir de (3) se puede escribir:

$$E_0 - E_1 = K \quad \text{o bien} \quad c(p_0 - p_1) = K \quad (5)$$

Por otro lado, como  $E^2 = c^2 \cdot p^2 + (m_0 c^2)^2$  y  $E = K + m_0 c^2$  para el electrón, se tendrá:

$$(K + m_0 c^2)^2 = c^2 \cdot p^2 + (m_0 c^2)^2$$

que puede describirse como:

$$\frac{K^2}{c^2} + 2 \cdot K m_0 = p^2$$

Si tomamos  $p^2$  de (4) y  $K$  de (5) se llega a:

$$(p_0 - p_1)^2 + 2 m_0 c (p_0 - p_1) = p_0^2 + p_1^2 - 2 p_0 p_1 \cos \theta$$

que puede simplificarse a:

$$\frac{1}{p_1} - \frac{1}{p_0} = \frac{1}{m_0 c} (1 - \cos \theta)$$

Multiplicando por  $h$ , como  $p = \frac{h}{\lambda}$  se obtiene finalmente:

$$\lambda_1 - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta)$$

Al valor  $\frac{h}{m_0 c}$  se le denomina *longitud de onda Compton* ( $\lambda c$ ) y su valor es  $2.43 \cdot 10^{-12}$  m.

El máximo en que las longitudes incidente y dispersada coinciden se corresponde con choques de los fotones con electrones muy fuertemente ligados. La masa característica del proceso no es entonces la del electrón, sino la del átomo completo  $M \gg m_0$  y en ese caso  $\lambda_1 \approx \lambda_0$ .

Puede comprobarse que, si  $\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_0$  es mucho menor que las longitudes de onda incidente y dispersada, el efecto Compton no es apreciable y las predicciones clásicas son aceptables.

$$\Delta\lambda = \lambda c (1 - \cos \theta) \ll \lambda_1, \lambda_0 \rightarrow \lambda_1 \approx \lambda_0$$

Las predicciones clásicas fallan cuando las longitudes de los fotones incidentes son reducidas (mayor energía y frecuencias elevadas), al igual que la teoría clásica de la radiación térmica fallaba a frecuencias elevadas (en lo que se denominó *catástrofe ultravioleta*).

## 7- Naturaleza dual de la radiación electromagnética e hipótesis de De Broglie.

A partir de los experimentos anteriormente descritos, es obvio que se necesita una hipótesis corpuscular para los fenómenos de interacción entre la radiación y la materia. Pero, a su vez, una teoría ondulatoria es precisa para explicar algunos otros fenómenos como la interferencia o difracción de la radiación. Sea lo que sea la radiación, ésta se comporta en algunas circunstancias como una onda electromagnética y en otras como un chorro de partículas.

En principio, los físicos se sintieron “incómodos” ante este desdoblamiento en la naturaleza de la radiación. Pero Louis De Broglie fue aún más lejos en sus planteamientos. En su tesis doctoral (1924) propuso su famosa hipótesis que consistía en afirmar que la dualidad onda-corpúsculo no es exclusiva de la radiación electromagnética sino que es una propiedad de cualquier ente material. Por ejemplo, un electrón (una partícula esencialmente material), debe tener igualmente asociada una onda cuya frecuencia está asociada con la energía del mismo según  $E = h\nu$ .

Asimismo, la cantidad de movimiento del electrón (o de cualquier otro ente material) se relacionará con la longitud de onda de su onda asociada según

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

Obsérvese cómo los conceptos corpusculares de energía y cantidad de movimiento se relacionan con los ondulatorios  $\nu$  y  $\lambda$  por medio de la constante de Planck.

En experimentos cotidianos con objetos macroscópicos que se mueven a velocidades habituales, la naturaleza ondulatoria no se revela puesto que la longitud de onda es tan pequeña que no puede detectarse por ningún instrumento de medida. Es preciso descender al mundo microscópico, a partículas materiales con impulsos  $p$  mucho menores para que la longitud de onda asociada pueda ser detectada.

Las hipótesis de De Broglie se vieron confirmadas en 1927 cuando Davisson y Germer (1927) y G. P. Thomson simultánea e independientemente realizaron experimentos de difracción (fenómeno asociado a las ondas) con electrones.

Sin embargo, esta doble naturaleza onda-corpúsculo de la materia no se presenta simultáneamente. Es decir, si en un experimento concreto la radiación o la materia muestra su naturaleza ondulatoria, no se podrá probar en él la naturaleza corpuscular y viceversa. Es el llamado *Principio de Complementariedad* de Niels Böhr.

## 8. Principio de incertidumbre.

Las leyes de la Física clásica (por ejemplo, las leyes de Newton) son eminentemente deterministas, es decir, conocidas las fuerzas que actúan sobre la partícula y las condiciones iniciales de su movimiento, puede predecirse el futuro del movimiento de forma exacta. Estos planteamientos han sido utilizados con gran éxito en el mundo macroscópico, por ejemplo, en Astronomía para predecir el movimiento de los cuerpos celestes.

Pero hay una cuestión que no estamos teniendo en cuenta hasta ahora y es que, en el proceso de observación, el observador interactúa con el sistema. Y la pregunta que surge es, ¿esa

interacción que requiere el proceso de observación puede provocar un cierto grado de incertidumbre o desconocimiento en la medida?

Lo primero que hay que considerar es que para medir u observar algo hay que iluminarlo para poder verlo. Iluminarlo significa hacer incidir sobre el objeto fotones. En sistemas macroscópicos, la interacción con uno o más fotones, evidentemente no altera esencialmente la posición o velocidad de un objeto. Pero a nivel microscópico, hemos visto cómo, por ejemplo, en el efecto Compton, la interacción de un fotón con un electrón altera significativamente la posición y velocidad del electrón.

A partir de las relaciones de De Broglie, Heisenberg cuantificó la precisión máxima con la que pueden conocerse simultáneamente la posición y velocidad (cantidad de movimiento) de una partícula en sus conocidas relaciones de incertidumbre

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}; \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{h}{4\pi}; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{h}{4\pi}$$

Es importante resaltar que esta incertidumbre no está motivada por deficiencias en la tecnología o en el diseño de los experimentos. Es una incertidumbre inherente a la naturaleza, que rompe con la visión determinista clásica y obliga a los físicos a hablar a partir de ahora en términos de probabilidad de que la partícula se encuentre en una determinada posición y/o con una determinada velocidad. En efecto, como el hecho de observar un sistema produce en él una perturbación no completamente predecible, todo proceso de observación cambia el movimiento anterior del sistema a un nuevo estado que no puede ser conocido con total exactitud.

El principio de incertidumbre tiene una segunda parte que establece la incertidumbre en el conocimiento simultáneo de la energía de una partícula y el valor exacto del tiempo necesario para medirla (por ejemplo, el intervalo  $\Delta t$  durante el cual un fotón es emitido de un átomo con una variación de energía  $\Delta E$ ). Esta relación es:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}.$$

Nótese de nuevo que, debido a la pequeñez de la constante de Planck ( $\approx 10^{-34}$ ) esta indeterminación pasa completamente desapercibida en el mundo macroscópico.

## 9. Algunos comentarios sobre la filosofía de la teoría cuántica.

Es cierto que la teoría cuántica explica aceptablemente los fenómenos a nivel atómico y nuclear. Pero hay algo en sus planteamientos que no satisface plenamente a la comunidad científica, y es que, según Einstein “la creencia en un mundo externo independiente del sujeto que lo percibe es la base de toda la ciencia natural”. Y, sin embargo, la mecánica cuántica

considera las interacciones entre sujeto y objeto como condicionantes de la realidad última. Es atractivo para los científicos la idea de concebir un universo objetivo más allá del concepto de nuestra percepción, pero la teoría cuántica se restringe a la descripción de las relaciones entre percepciones, descripción que, por otra parte, reposa en último término en afirmaciones probabilísticas. “Dios no juega a los dados con el universo” había dicho Einstein, rechazando que la teoría cuántica fuera el último escalón del conocimiento y esperando que posteriores descubrimientos (aun por producirse) desembocaran en una nueva teoría que contradiga la mecánica cuántica y altere sus fundamentos filosóficos. “Dios no sólo juega a los dados, sino que a veces los lanza donde no podemos verlos”, fue la réplica de S. Hawking. Hoy día no se han encontrado objeciones a la teoría cuántica, pero las teorías físicas sólo son válidas hasta que dejan de serlo. Será en ese momento (si es que se produce) cuando proceda revisar nuestro concepto filosófico del universo.

#### 10. La ecuación de onda de Schrödinger.

Recapitulando, hemos mostrado evidencias experimentales de que tanto la radiación como la materia tienen un comportamiento dual, es decir, una partícula microscópica (un electrón, por ejemplo) se comporta como si ciertos aspectos de su movimiento estuvieran gobernados por las propiedades de su onda asociada. La hipótesis de De Broglie predice adecuadamente la longitud de esta onda asociada en casos relativamente sencillos (una partícula libre). Si la partícula está afectada por una fuerza que hace variar su impulso  $p$ , la longitud de onda no será constante y serán necesarias funciones de onda más complicadas para su correcta descripción.

La ecuación de Schrödinger es la ecuación que proporciona la función  $\psi(\vec{x}, t)$  (que contiene toda la información necesaria sobre una partícula o sistema) conocido el campo de fuerzas que actúa sobre la partícula o, equivalentemente, la energía potencial asociada a dicha fuerza (que deberá ser, necesariamente, conservativa).

Para obtener la ecuación de Schrödinger partimos de la función de onda de una partícula libre en la forma más general posible, esto es, expresada de forma compleja

$$\psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(kx - \omega t)$$

Diferenciando respecto a  $x$ , se obtiene:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -k \cdot \operatorname{sen}(kx - \omega t) + i \cdot k \cdot \cos(kx - \omega t) = i \cdot k [\cos(kx - \omega t) + i \cdot \operatorname{sen}(kx - \omega t)]$$

Pero como  $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi \cdot p}{h} = \frac{p}{\hbar}$  donde se ha definido  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ , encontramos que

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = i \frac{p}{\hbar} \psi(x, t) \quad \text{o bien} \quad p[\psi(x, t)] = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} [\psi(x, t)]$$

que puede interpretarse como una equivalencia entre la cantidad de movimiento  $p$  y el operador diferencial  $-i \hbar \partial / \partial x$ . Es decir, el efecto de multiplicar la función de onda por  $p$  es el mismo que el de hacerlo por el operador  $-i \hbar \frac{\partial}{\partial x}$ .

Diferenciando ahora respecto a  $t$  se encuentra otra equivalencia para la energía:

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \omega \cdot \text{sen}(kx - \omega t) - i \cdot \omega \cdot \text{cos}(kx - \omega t) = -i \cdot \omega [\text{cos}(kx - \omega t) + i \cdot \text{sen}(kx - \omega t)]$$

Como  $E = h \cdot \nu = h \frac{\omega}{2\pi} = \hbar \cdot \omega \rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar}$ , y podrá escribirse:

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \psi(x, t) \quad \text{o bien} \quad E[\psi(x, t)] = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(x, t)]$$

y la equivalencia es entre los operadores  $E \leftrightarrow i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$ .

Aunque estas relaciones se han obtenido para una partícula libre, son válidas en general y a partir de ellas se puede obtener la ecuación de Schrödinger. La conservación de la energía (recuérdese que estamos considerando fuerzas conservativas) exige

$$Ec + Ep = E \rightarrow \frac{p^2}{2m} + U(x, t) = E$$

Sustituyendo las equivalencias entre operadores, se obtiene:

$$\frac{1}{2m} (-i \hbar \frac{\partial}{\partial x})^2 + U(x, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Como  $(-i \hbar)^2 = -\hbar^2$  y  $(\frac{\partial}{\partial x})^2 = (\frac{\partial}{\partial x})(\frac{\partial}{\partial x}) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ , se tiene finalmente:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

que es una relación entre operadores. Tiene sentido cuando se aplica a cualquier función de onda pues, como hemos visto, no es otra cosa que el principio de conservación de la energía. En definitiva, al operar con una función de onda cualquiera, se obtiene la ecuación de Schrödinger para esa función de onda:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x, t) = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

cuya solución  $\psi(x,t)$  será la función de onda asociada a la partícula que se considere. En la ecuación anterior  $m$  es la masa de la partícula que se desea estudiar y  $U(x,t)$  es la energía potencial asociada al campo de fuerzas (conservativas) que actúa sobre la partícula.

La función de onda solución del problema será, en general, compleja; no debemos intentar dar un sentido físico a dicha función, es solamente un recurso matemático, un elemento de cálculo que predice adecuadamente algunas propiedades; nunca una realidad en sí misma.

Concretamente, la conexión básica entre las propiedades de la función de onda  $\psi(x,t)$  y el comportamiento de la partícula asociada se expresa en términos del postulado de Born, debido a Max Born (1926). Dicho postulado establece que: “Si en el instante “t” se realiza una medida de la posición de la partícula asociada a la función  $\psi(x,t)$ , entonces la probabilidad  $P(x,t)$  de encontrar la partícula en una coordenada comprendida entre  $x$  y  $x + dx$  es  $\psi^*(x,t)\psi(x,t)$ ” donde  $\psi^*$  representa el complejo conjugado de  $\psi(x,t)$  (recuérdese que conjugar consiste en cambiar de signo la parte imaginaria). El postulado de Born tiene sentido puesto que  $\psi^*\psi$  es siempre positiva y, si la función de onda está normalizada, su valor está comprendido entre 0 y 1, como exige la probabilidad.

En efecto, dada una función genérica  $\psi(x,t) = \text{Re}(x,t) + i \cdot \text{Im}(x,t)$ , donde  $\text{Re}(x,t)$  e  $\text{Im}(x,t)$  representan, respectivamente, la parte real e imaginaria de la misma, se tendrá

$$\psi^*(x,t) = \text{Re}(x,t) - i \cdot \text{Im}(x,t).$$

Por lo que:

$$\begin{aligned} \psi^*(x,t)\psi(x,t) &= [\text{Re}(x,t) - i \cdot \text{Im}(x,t)] [\text{Re}(x,t) + i \cdot \text{Im}(x,t)] = \\ &= \text{Re}^2(x,t) - i^2 \cdot \text{Im}^2(x,t) = \text{Re}^2(x,t) + \text{Im}^2(x,t) \geq 0 \end{aligned}$$

Antes se ha mencionado que la función de onda debe estar normalizada. Esa normalización consiste en imponer que la probabilidad de encontrar a la partícula en algún lugar del espacio sea 1, es decir, que la partícula exista. Matemáticamente

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x) \cdot dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\psi(x,t) \cdot dx = 1$$

Dicha condición permite determinar algunas constantes de la función de onda y darles el valor adecuado.

Cuando la energía potencial no dependa del tiempo, la ecuación de Schrödinger se puede simplificar a la denominada ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + U(x) \cdot \varphi(x) = E \cdot \varphi(x)$$

donde  $\varphi(x)$  expresa la dependencia espacial de la función de onda. Puede demostrarse que, en estos casos en que  $U = U(x)$  la función de onda completa es una onda estacionaria dada por

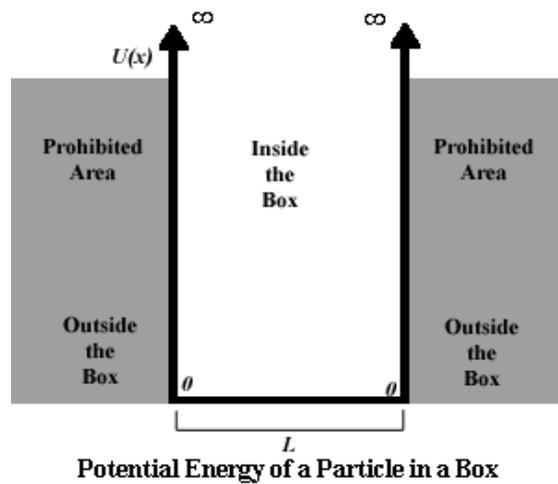
$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t} = \varphi(x) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} \cdot t}.$$

Ejemplo de aplicación de la ecuación de Schrödinger: Partícula en una caja.

Consideremos una partícula dentro de un pozo de potencial infinito del que no puede escapar, es decir:

$$U(x) = 0 \quad \text{si} \quad 0 \leq x \leq L$$

$$U(x) = \infty \quad \text{si} \quad x < 0; x > L$$



Como la energía potencial es  $\infty$  en los extremos de la caja, la partícula nunca podrá superarla y  $\varphi(x) = 0$  fuera de la caja. Como  $U = U(x)$ , la ecuación a resolver será la ecuación independiente del tiempo con  $U(x) = 0$  en el interior de la caja.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E \cdot \varphi(x)$$

Operando:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -\frac{2m \cdot E}{\hbar^2} \varphi(x) = -cte^2 \cdot \varphi(x)$$

donde se ha definido

$$\frac{2m \cdot E}{\hbar^2} = cte^2 \equiv k^2$$

La ecuación anterior es análoga a la de un movimiento armónico simple<sup>1</sup>. Por tanto, la solución será:

$$\varphi(x) = A \cdot \text{sen}(kx + \phi)$$

Las condiciones de contorno del problema  $\left. \begin{array}{l} \varphi(x=0) = 0 \\ \varphi(x=L) = 0 \end{array} \right\}$  permiten determinar las constantes. En efecto:

$$0 = A \cdot \text{sen}(0 + \phi) \rightarrow \text{sen}\phi = 0 \rightarrow \phi = 0$$

$$0 = A \cdot \text{sen}(k \cdot L) \rightarrow \text{sen}(k \cdot L) = 0 \rightarrow k \cdot L = n \cdot \pi \rightarrow k = \frac{n \cdot \pi}{L}$$

donde  $n = 1, 2, 3$ , etc. El valor  $n = 0$  no es posible porque ni  $k$  ni  $L$  son nulos (dicho de otro modo, la solución  $n = 0$  no es una función de onda).

Sustituyendo en nuestro cambio de variable  $k^2 = \frac{2m \cdot E}{\hbar^2}$  se obtienen los posibles valores de energía de la partícula:

$$E = \frac{k^2 \cdot \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2}{2m \cdot L^2}$$

La energía de la partícula está cuantizada y dicha cuantización aparece de forma natural al resolver la ecuación de Schrödinger que gobierna su comportamiento. El valor  $E = 0$  no está permitido, es decir, la partícula no puede estar en reposo porque se violaría el principio de incertidumbre. Como  $\Delta x \approx L$ ,  $\Delta p$  no puede ser nulo porque  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$ .

Finalmente, la función de onda será:

$$\varphi(x) = A \cdot \text{sen}\left(\frac{n \cdot \pi}{L} \cdot x\right)$$

La condición de normalización  $\int_{-\infty}^{\infty} P(x) \cdot dx = 1 \rightarrow \int_0^L A^2 \cdot \text{sen}^2\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}\right) \cdot dx = 1$  permite determinar el valor de  $A$ . Integrando se obtiene:

$$A^2 \frac{1}{2} \left[ x - \frac{L}{2\pi \cdot n} \cdot \text{sen}\left(\frac{2n \cdot \pi \cdot x}{L}\right) \right]_0^L = 1$$

---

<sup>1</sup> Recuérdese que la ecuación para el sistema masa-muelle  $\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{k}{m} \cdot x$  tenía por solución  $x = A \cdot \text{sen}\left(\frac{k}{m} \cdot t + \phi\right)$ . Como las ecuaciones son formalmente idénticas, puede trasladarse el resultado identificando correctamente las variables.

Y, despejando para obtener el valor de  $A$ :  $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

donde se ha empleado la relación  $\text{sen}^2 \alpha = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cdot \cos 2\alpha$ ).

Por tanto, la función de onda normalizada será:

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left( \frac{n\pi}{L} x \right).$$