



# Fundamentos de mecánica cuántica

Viewing: Atomic weight

1	2											13	14	15	16	17	18
H 1.00794	He 4.002602											B 10.811	C 12.011	N 14.007	O 15.999	F 18.998	Ne 20.18
3	4											19	20	21	22	23	24
Li 6.941	Be 9.0122											Al 26.981	Si 28.086	P 30.974	S 32.065	Cl 35.453	Ar 39.948
5	6	7	8	9	10	11	12										
Na 22.990	Mg 24.305	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
K 39.098	Ca 40.078	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48
Rb 85.468	Sr 87.62	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66
Cs 132.91	Ba 137.33	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88
Fr 223	Ra 226	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub						

89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102
Lanthanide Series Ce 140.12	Pr 140.91	Nd 144.24	Pm 144.91	Sm 150.36	Eu 151.97	Gd 157.25	Tb 158.93	Dy 162.5	Ho 164.93	Er 167.26	Tm 168.93	Yb 173.04	Lu 174.97
Actinide Series Th 232.04	Pa 231.04	U 238.03	Np 237	Pu 244.1	Am 243.1	Cm 247.1	Bk 247.1	Cf 251.1	Es 252.1	Fm 257.1	Md 258.1	No 259.1	Lr 262.1

# Estructura de la Materia

## Unidad 1

Sigfrido Escalante Tovar  
6-feb-2023

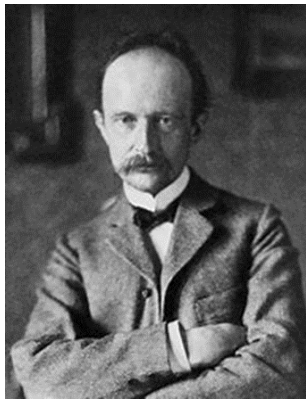


# Los grandes cambios

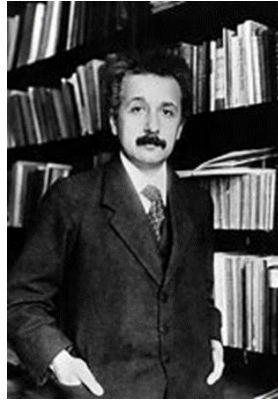
- Ondas electromagnéticas: J.C. Maxwell 1864.
- El electrón como partícula: J.J. Thompson, 1897.
- La cuantización de la energía: M. Planck, 1900.
- La luz como partícula: A. Einstein, 1905.
- El átomo cuántico: N. Bohr, 1913.
- El electrón como onda: L. V. de Broglie, 1923.
- La mecánica cuántica: E. Schrödinger, 1926.
- La controversia Bohr-Einstein



# La teoría cuántica



M. Planck  
42 años



A. Einstein  
26 años



N. Bohr  
28 años



E. Schrödinger  
43 años





# Algunos protagonistas



J. C. Maxwell  
33 años



N. Bohr 28 años



L.V. de Broglie  
31 años



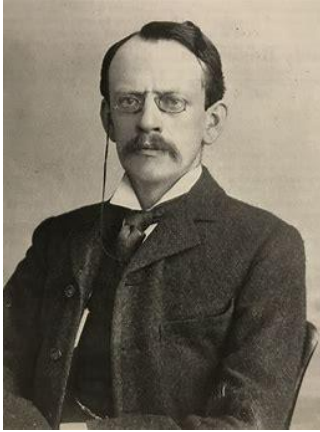
W. Pauli  
23 años



Max Born  
45 años  
(abuelo de Olivia  
Newton-John)



# Otros protagonistas



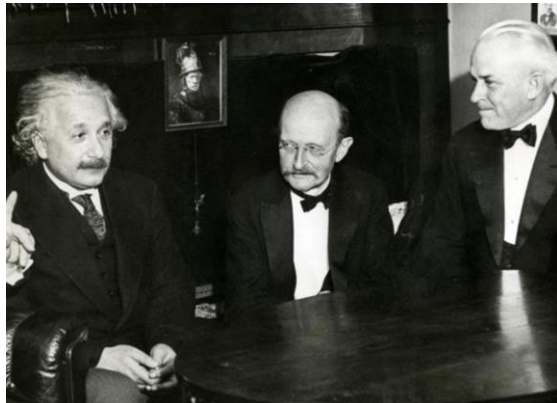
J. J. Thompson  
padre



G. P. Thompson  
hijo



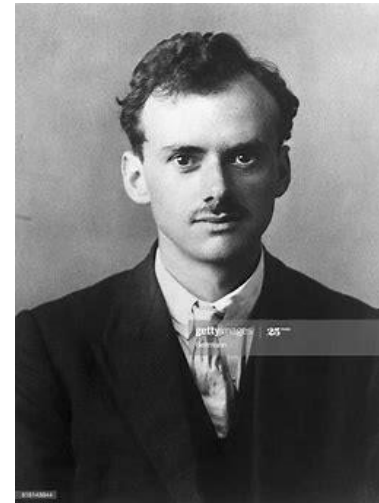
W. Heisenberg  
24 años



Einstein y Planck



Planck de joven

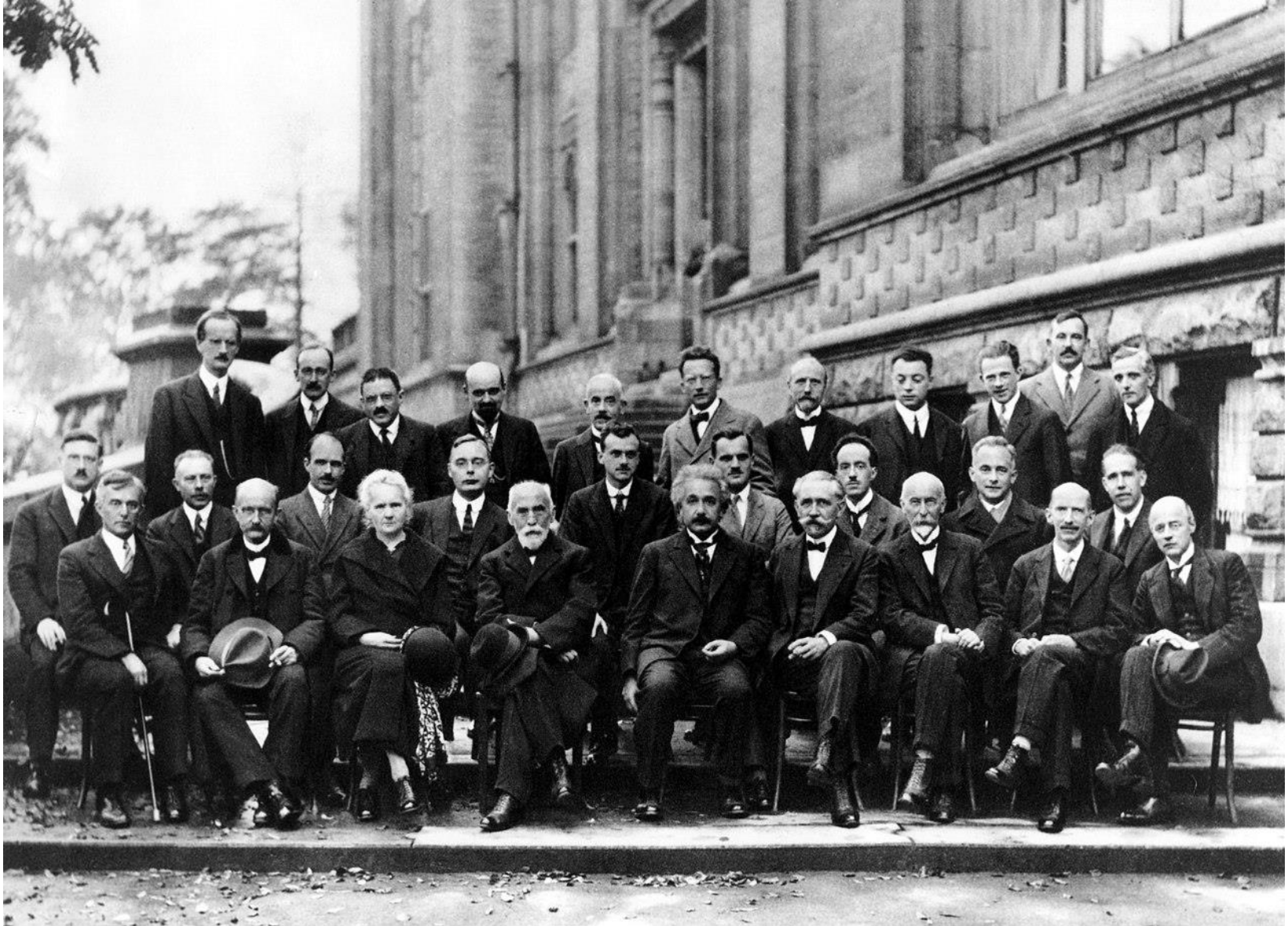


P.A.M. Dirac





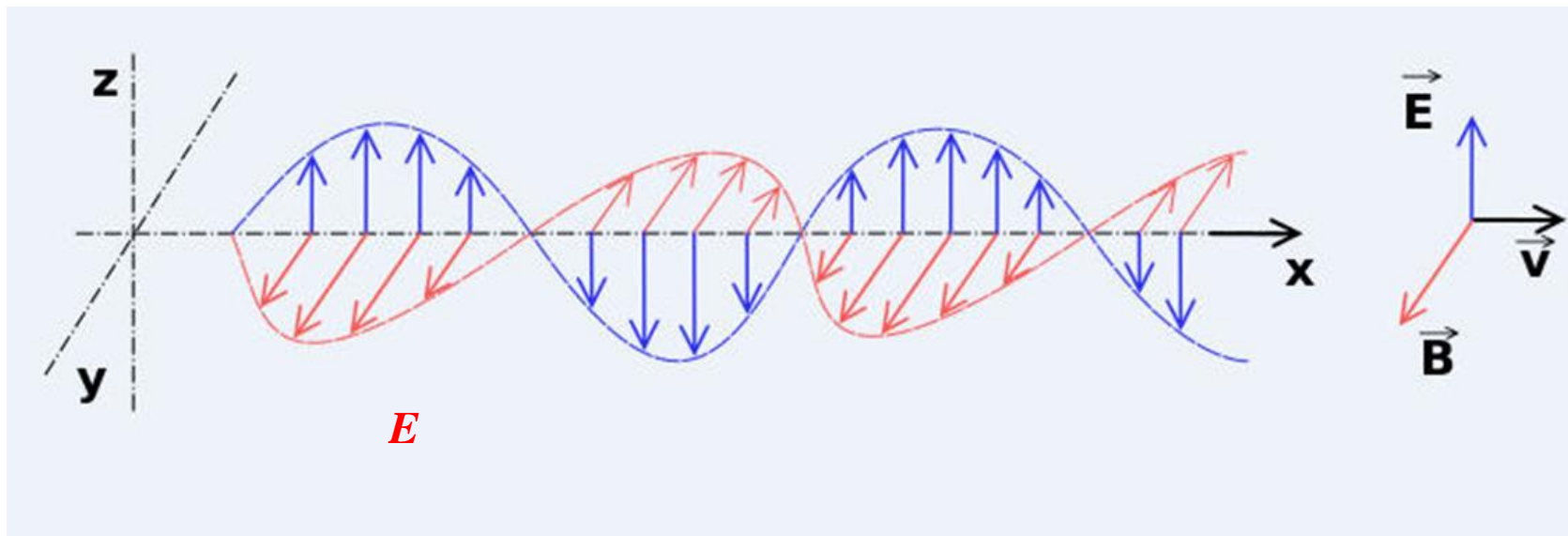
# La “pandilla” científica



¿A quiénes logran identificar?



# Onda electromagnética



## Características y propiedades de las ondas electromagnéticas:

Velocidad  $v$ :  $c = 299\,792\,458\text{ m s}^{-1}$

Longitud de onda:  $\lambda$

Período:  $\tau$

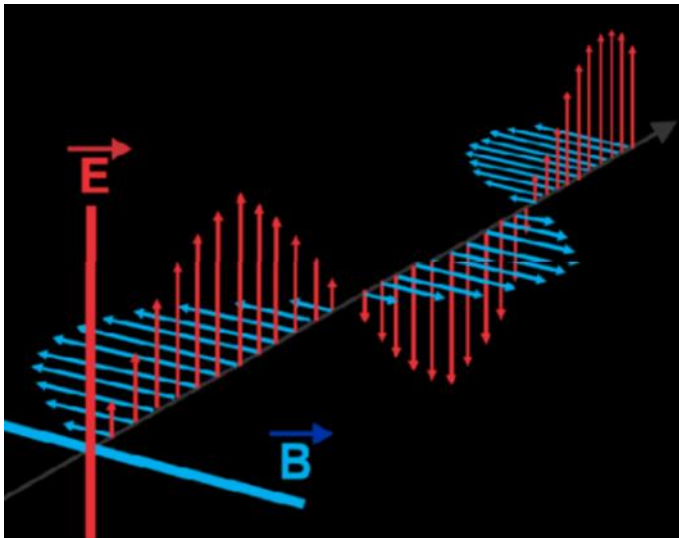
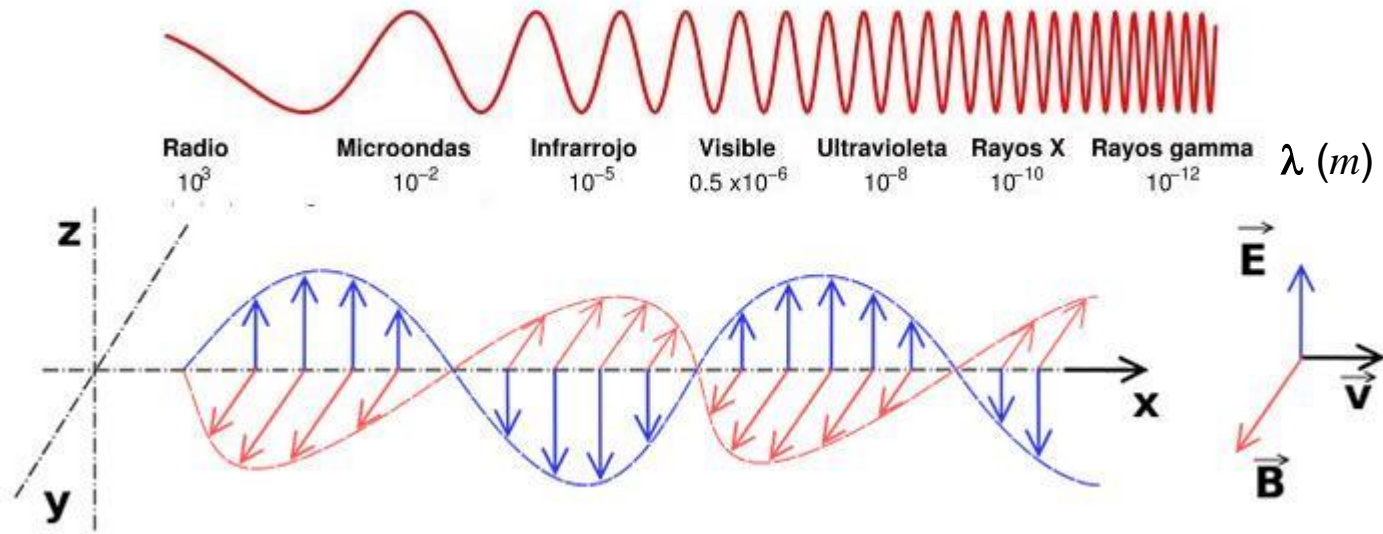
Frecuencia:  $\nu$

Energía:  $E$

Naturaleza: **dual**



# Onda electromagnética



Si una carga eléctrica  $q$  se encuentra en la trayectoria de propagación de la onda electromagnética, será perturbada por ésta.

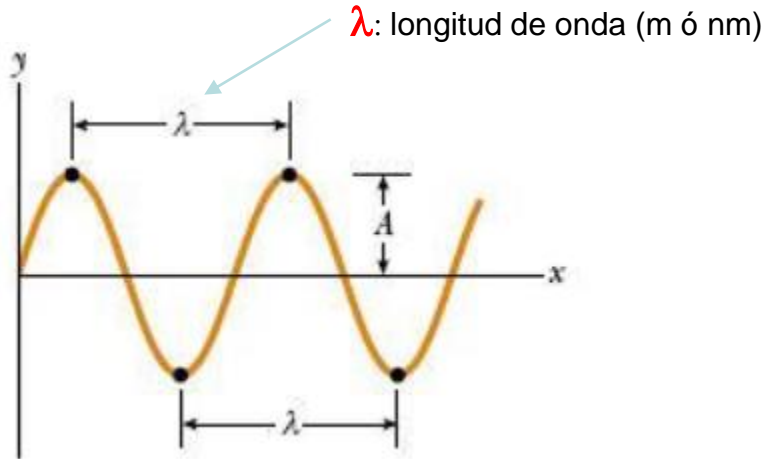




# Descripción de una onda

$$y = f(x - cT)$$

$$E(x, T) = A \text{sen} 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - cT \right)$$

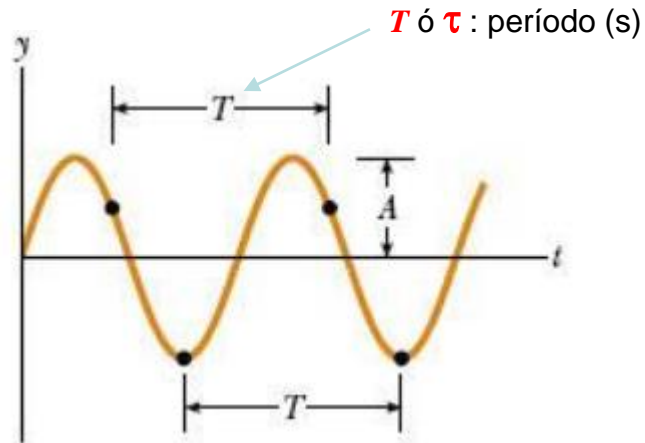


$$c = \lambda \nu$$

$c$ : velocidad de una onda electromagnética

$$c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$$

$$c \sim 3 \times 10^5 \text{ Km s}^{-1}$$

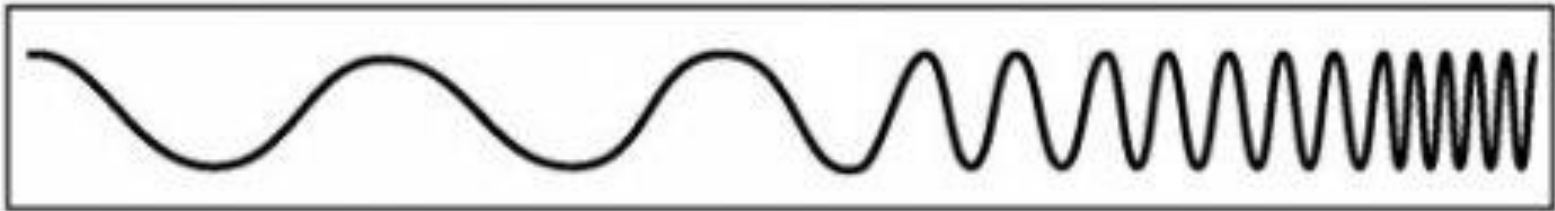
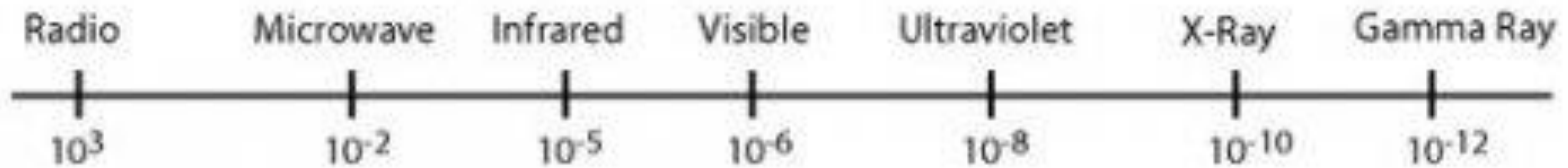


La frecuencia ( $\nu$ ) es el número de ciclos completos por segundo (ciclos/seg = Hz =  $s^{-1}$ )

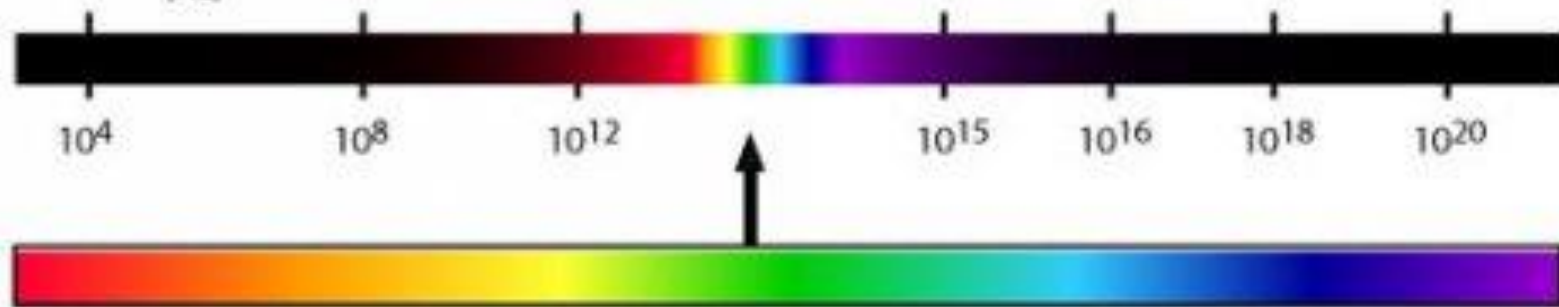


# Espectro electromagnético

Wavelength  
(metres)



Frequency  
(Hz)

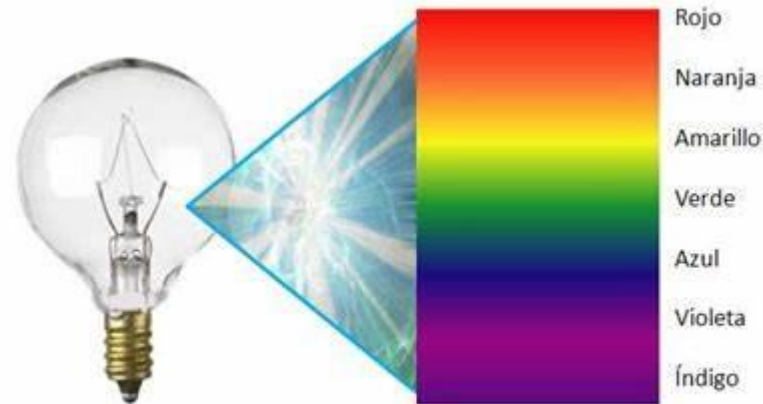
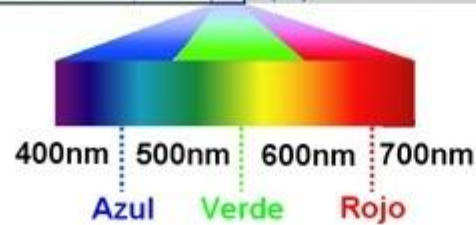
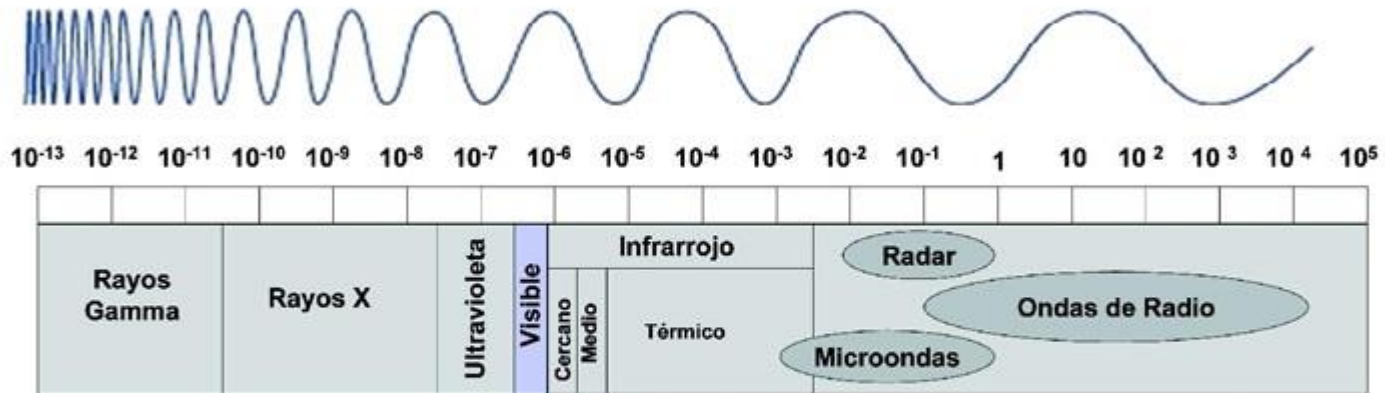


$E = h\nu$



# Espectro electromagnético.

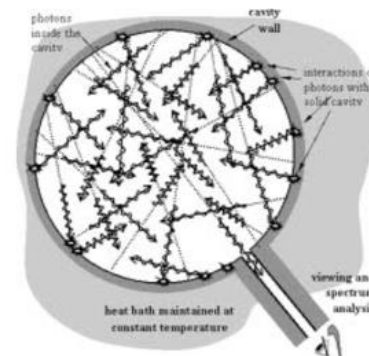
Longitud de onda ( $\lambda$ ) en metros.





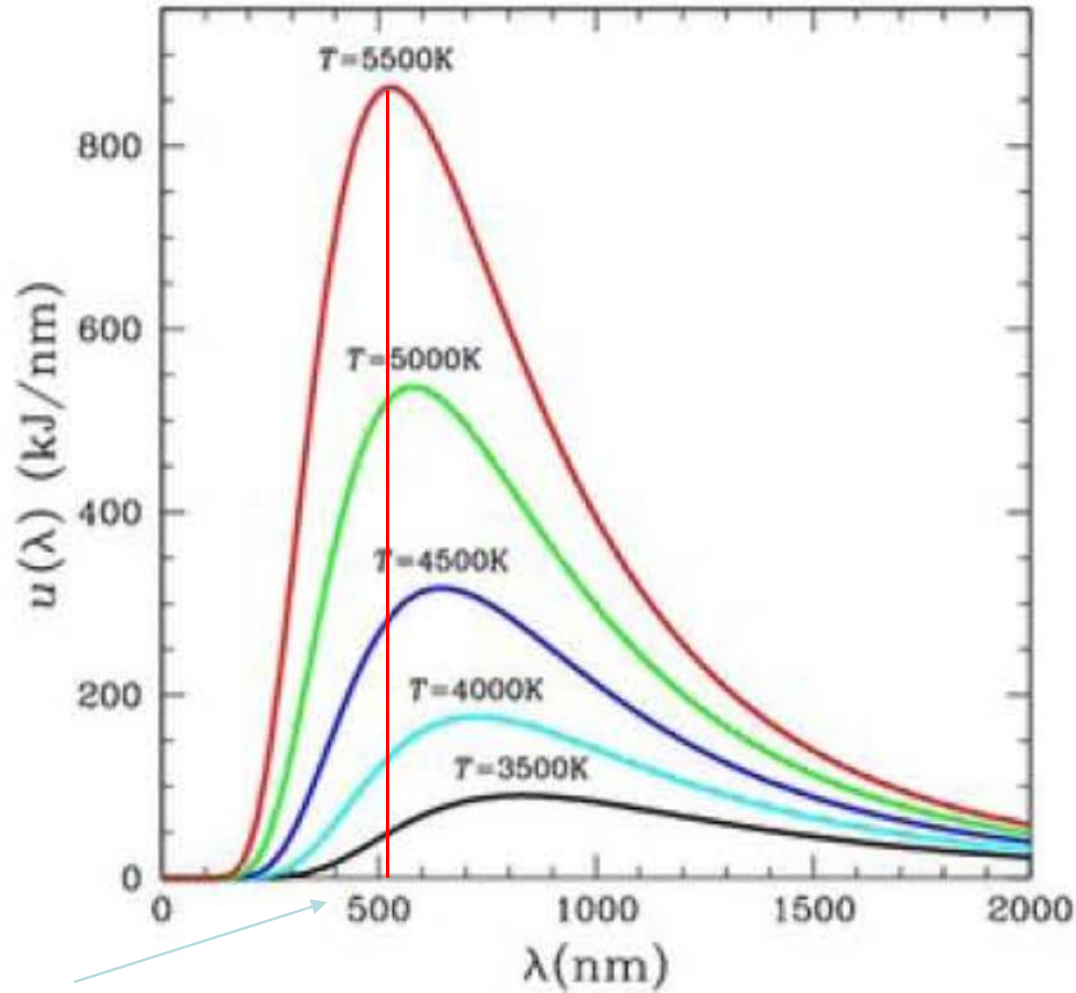
# Cuantización de la energía

- En 1900 se creía que la energía se intercambiaba de forma continua.
- Todavía no se conocía la estructura de los átomos.
- Max Planck era un estudiante de física interesado en el tema.
- Su trabajo de tesis transformó radicalmente la física.
- Lo logró explicando la llamada radiación de **cuerpo negro**.





# Radiación de cuerpo negro



$\lambda_{max}$

$$\lambda_{max} = \frac{\beta}{T}$$

Ley de desplazamiento de Wien de 1893. (empírica)





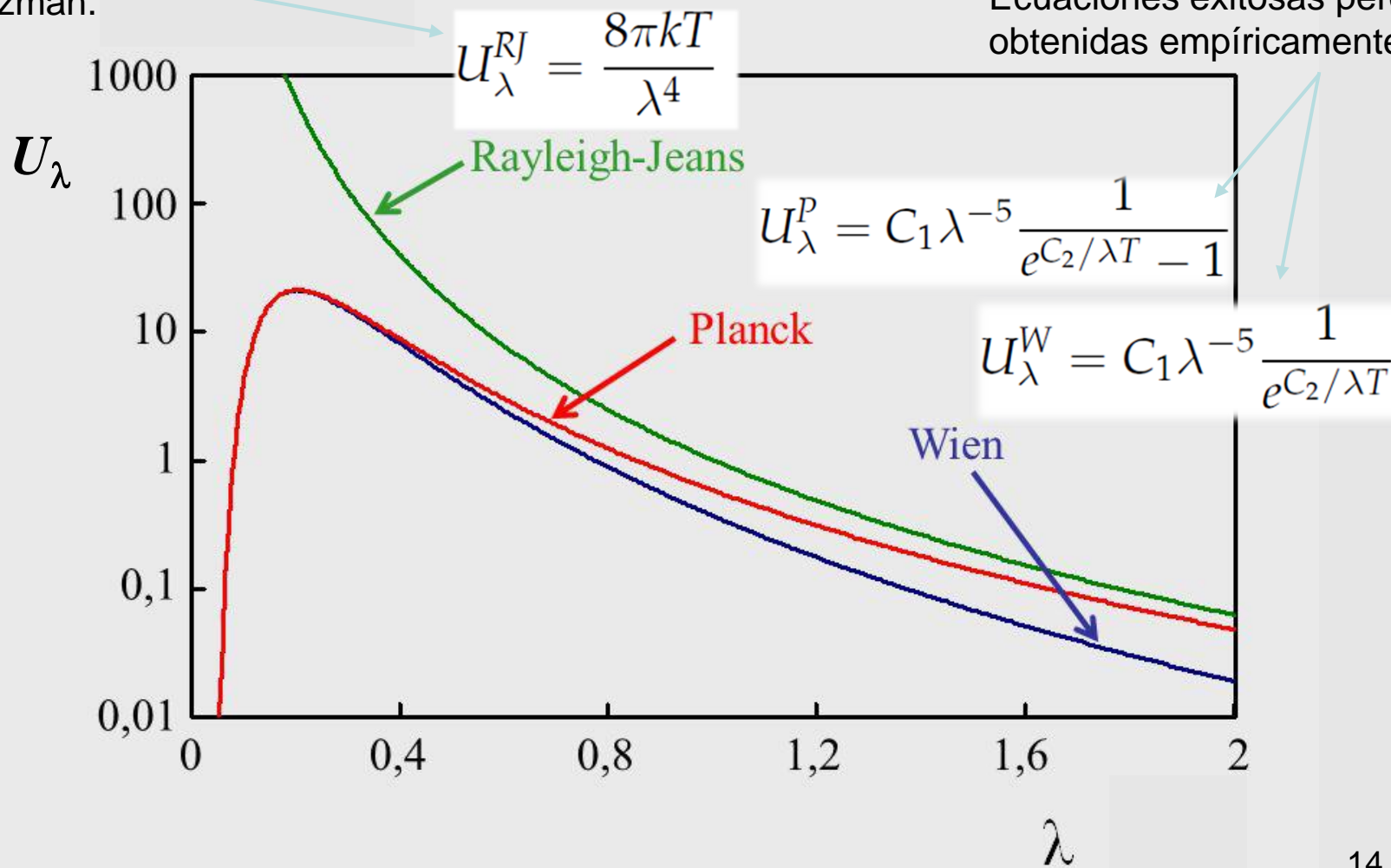
# La catástrofe en UV

Ecuación fallida de Rayleigh-Jeans derivada teóricamente del principio de equipartición de energía de Boltzman.

$$C_1 = 4.99 \times 10^{-24} \text{ J m}$$

$$C_2 = 1.438 \times 10^{-2} \text{ m K}$$

Ecuaciones exitosas pero obtenidas empíricamente.





# ¿Qué hizo Planck?

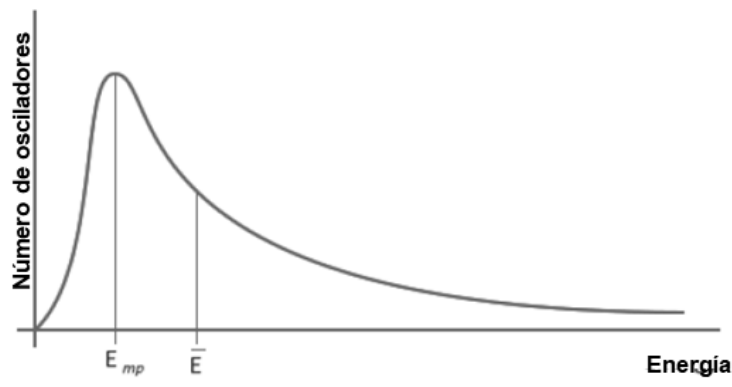
Como  $c = \lambda \nu$ ,  $U_\lambda$  puede expresarse usando indistintamente  $\lambda$  o  $\nu$ :

$$U_\lambda^P = C_1 \lambda^{-5} \frac{1}{e^{C_2/\lambda T} - 1} = C_1 \frac{\nu^5}{c^5} \frac{1}{e^{C_2\nu/cT} - 1}$$

Planck llegó a una relación entre la *densidad de energía*  $U_\lambda$  y la energía de las partículas vibrantes (osciladores) en el cuerpo negro,  $U$ :

$$U_\lambda = \frac{8\pi\nu^4}{c^4} U$$

Consideró una distribución de Maxwell-Boltzmann para  $U$ .



$$U_\lambda = \frac{8\pi\nu^4}{c^4} \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/kT} - 1}$$



# ¿Qué hizo Planck?

Si comparamos la ecuación obtenida empíricamente por Planck:

$$U_{\lambda}^P = C_1 \frac{\nu^5}{c^5} \frac{1}{e^{C_2\nu/cT} - 1}$$

Con la ecuación obtenida con su modelo de osciladores vibrantes:

$$U_{\lambda} = \frac{8\pi\nu^4}{c^4} \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/kT} - 1}$$

Planck supuso que la energía de los osciladores estaba repartida en porciones finitas de magnitud  $\varepsilon$ .

¿Qué le falta a esta última para parecerse a la anterior?

$$\varepsilon = h\nu$$

Las constantes  $C_1$  y  $C_2$  resultan ser:

$$C_1 = 8\pi h c$$

$$C_2 = \pi h/k$$

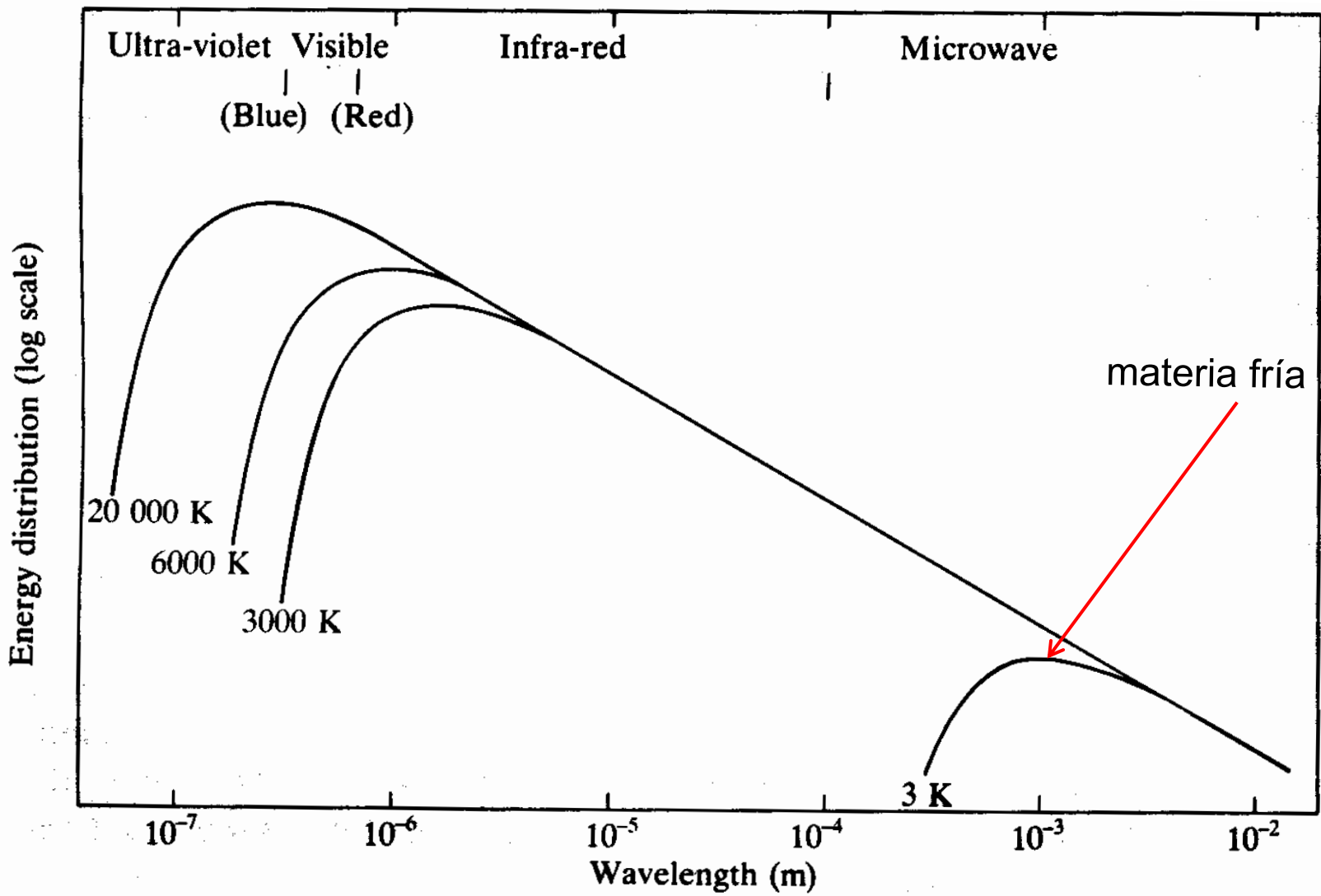
$$h = 6.6262 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

Si sustituyen  $\varepsilon$ ,  $C_1$  y  $C_2$  en la primera ecuación, llegarán a la de  $U_{\lambda}$ .



# La radiación cósmica de fondo.

## Indicio de la Gran Explosión.



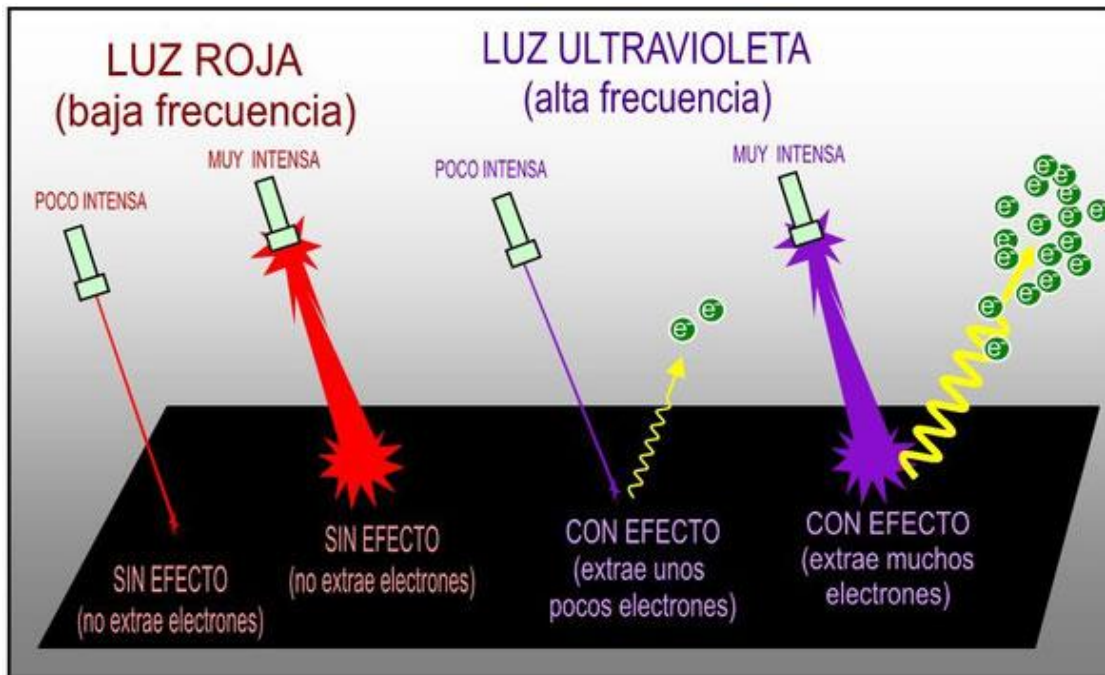
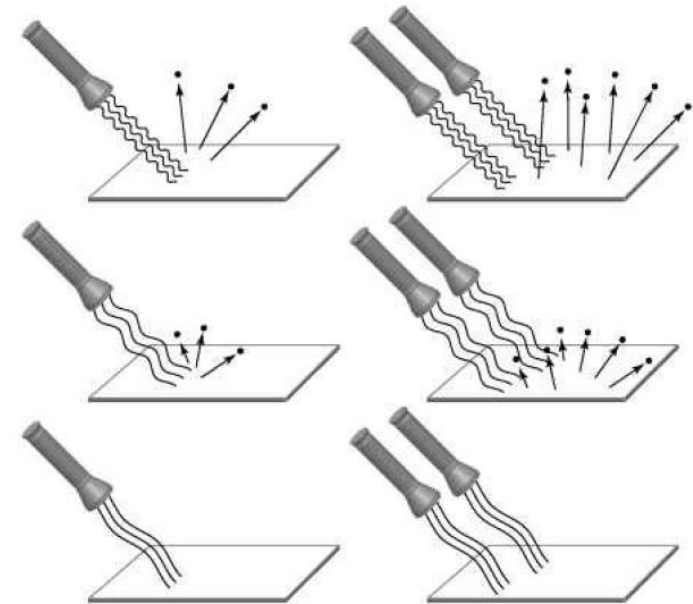


# Efecto fotoeléctrico

Consiste en la emisión de electrones de una superficie metálica cuando es irradiada con luz.

La fotoemisión depende de:

- El metal de que se trate.
- La frecuencia de la radiación empleada.
- No depende de la intensidad luminosa.







# Efecto fotoeléctrico

Intensidad luminosa

**baja**

**alta**

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

$\lambda$

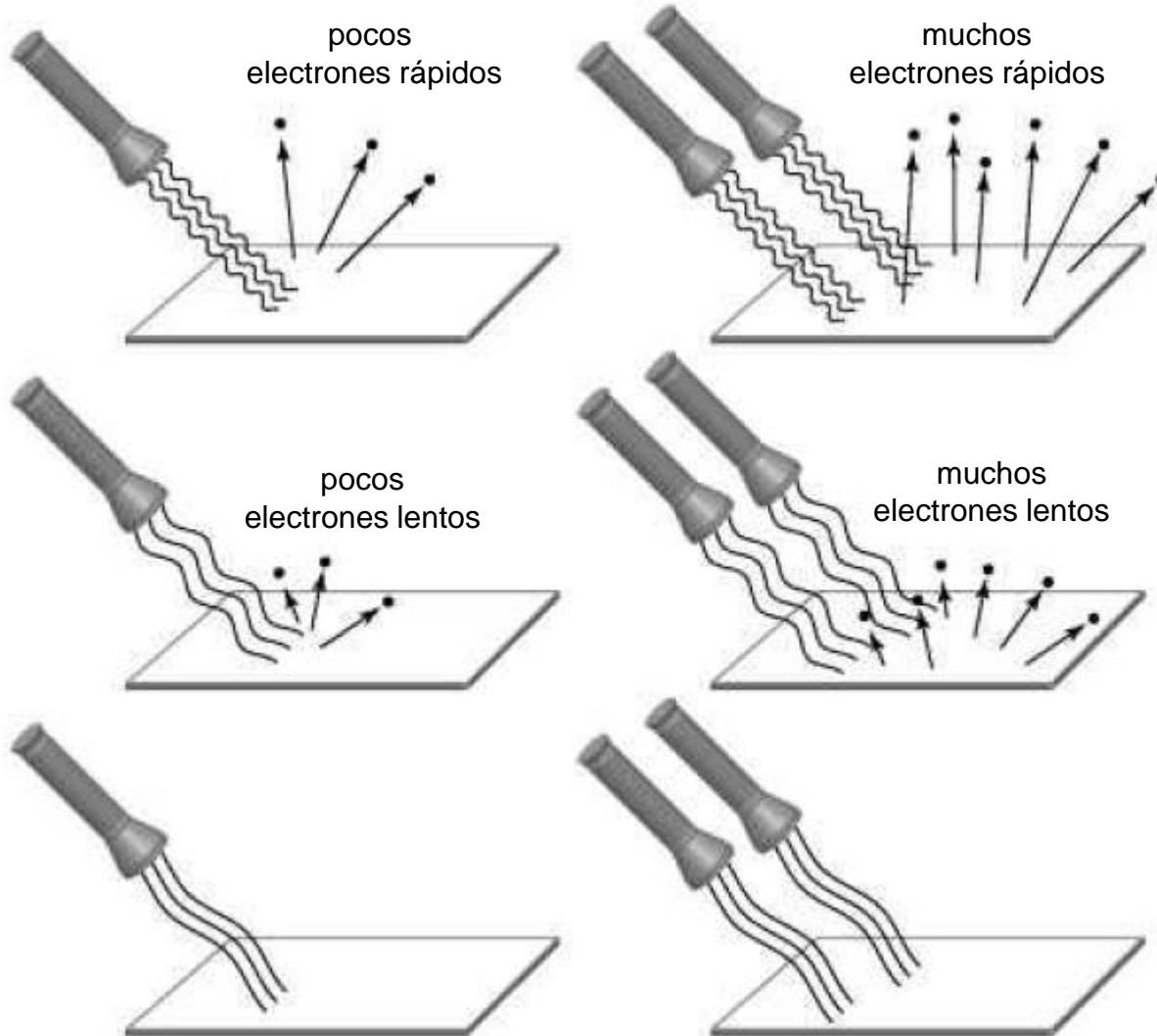
pocos  
electrones rápidos

muchos  
electrones rápidos

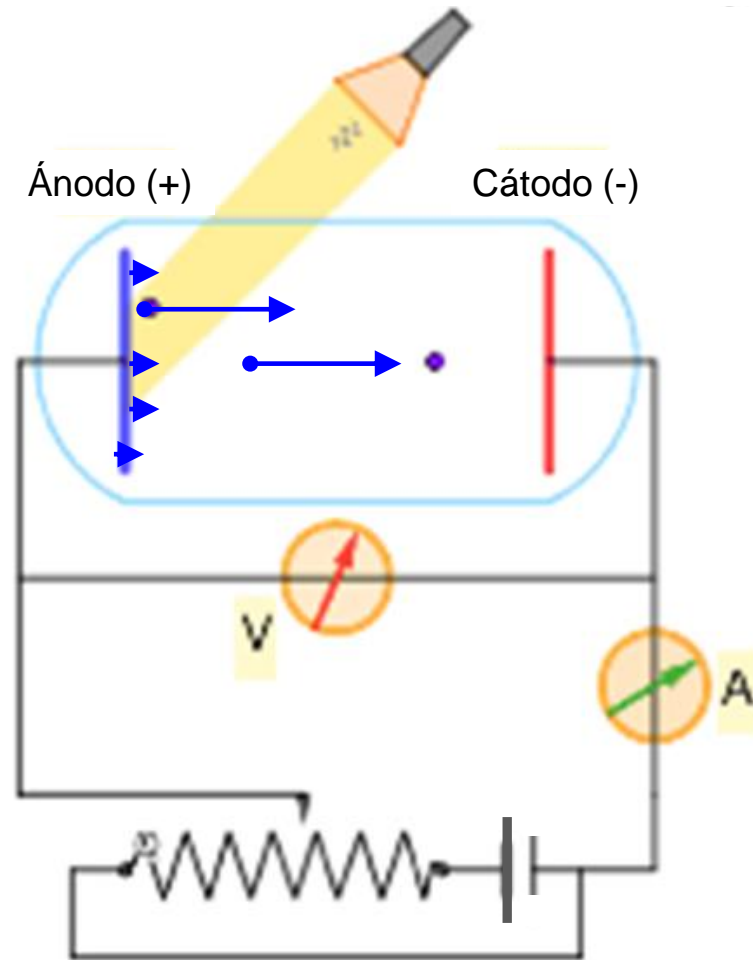
$\nu$

pocos  
electrones lentos

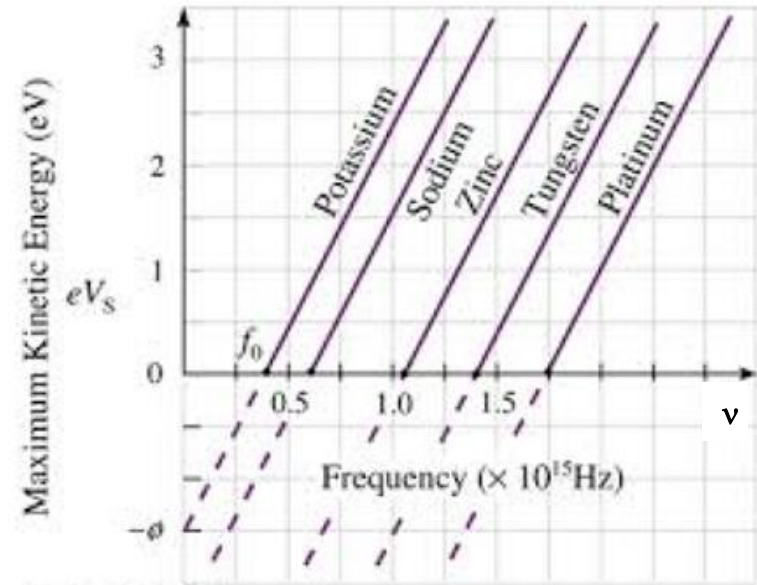
muchos  
electrones lentos



# Efecto fotoeléctrico



$$E_{c_{max}} = \frac{mv^2}{2} = eV_0$$



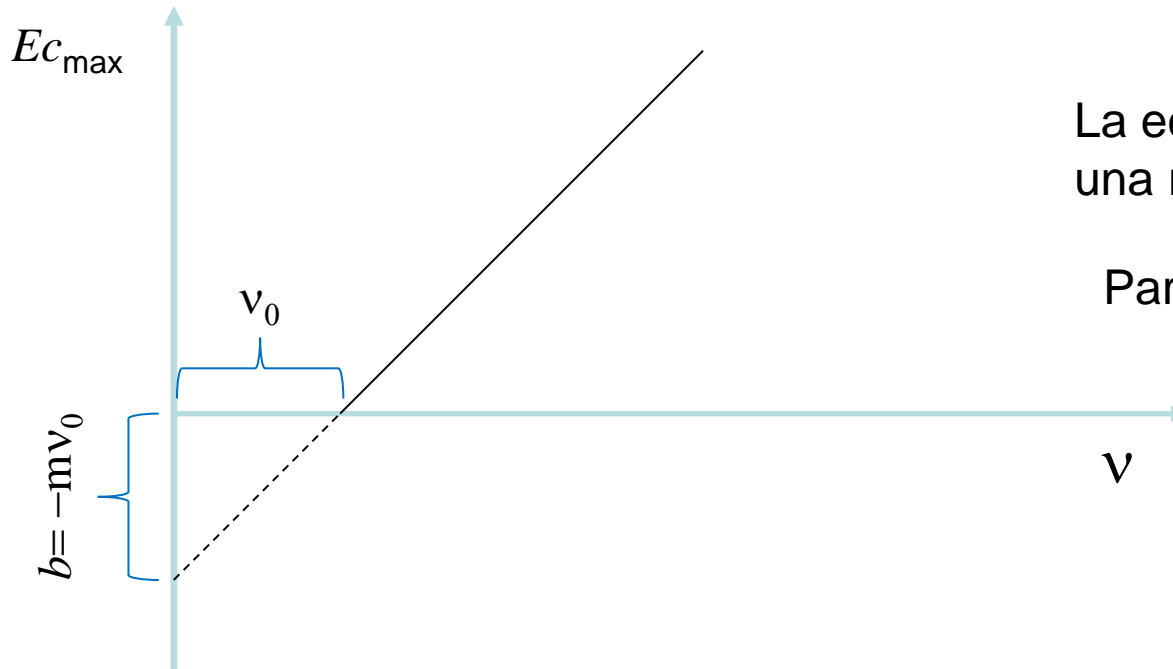
© 2009 Thomson - Brooks/Cole

## Resultados:

- La emisión es instantánea,  $10^{-9}$  s.
- Para  $\nu$  y  $V$  fijos, la corriente  $A$  depende de la intensidad luminosa  $I$ .
- Para una frecuencia  $\nu$  y una intensidad  $I$  fijos, la corriente depende del valor de  $V$ .
- Hay un valor de  $V$  que detiene la corriente. Ese valor es  $V_0$ .
- La emisión se logra cuando se alcanza un valor de superior a  $\nu_0$ .
- Para cualquier intensidad, la  $E_{c_{max}}$  depende linealmente de  $\nu$ .



# Efecto fotoeléctrico



La ecuación general de una recta es:  $y = mx + b$

Para este experimento:

$$Ec_{max} = m\nu + b$$

En 1905 Einstein propuso que :  $E_{luz} = \omega + Ec_{max}$

donde  $\omega$  representa la *energía de enlace* de los electrones al metal.

Si reorganizamos la expresión nos queda:  $Ec_{max} = E_{luz} - \omega$ .

Ésta corresponde a la ecuación de la recta mostrada. Si nombramos  $h$  a la pendiente  $m$  de la recta, la ecuación queda como:

$$Ec_{max} = h\nu - h\nu_0$$

$$h = 6.6262 \times 10^{-34} \text{ J s}$$



# Efecto fotoeléctrico

- $\nu_0$  se conoce como la *frecuencia umbral*, es decir, la mínima frecuencia requerida para producir efecto fotoeléctrico y es característica de cada metal.
- $\lambda_0$  sería la longitud de onda umbral, es decir, la máxima longitud de onda requerida para producir efecto fotoeléctrico y es característica de cada metal.



# Efecto fotoeléctrico

- Einstein propuso que el fenómeno se podía explicar como un resultado de una colisión entre 2 partículas: el electrón y una partícula luminosa que años después (1926) se llamaría **fotón**.
- La energía de este fotón es:  $E_f = h\nu$ .
- Einstein propuso esto de manera heurística ya que no pudo probarlo.
- Años después (1923) se comprobó experimentalmente mediante el efecto Compton.





# El fotón

- Einstein fue más allá. 12 años después propuso que:

$$p_f = \frac{h}{\lambda}$$

ya que  $E_f = h\nu$  y por otra parte  $E_f = mc^2$

igualando:  $h\nu = mc^2$

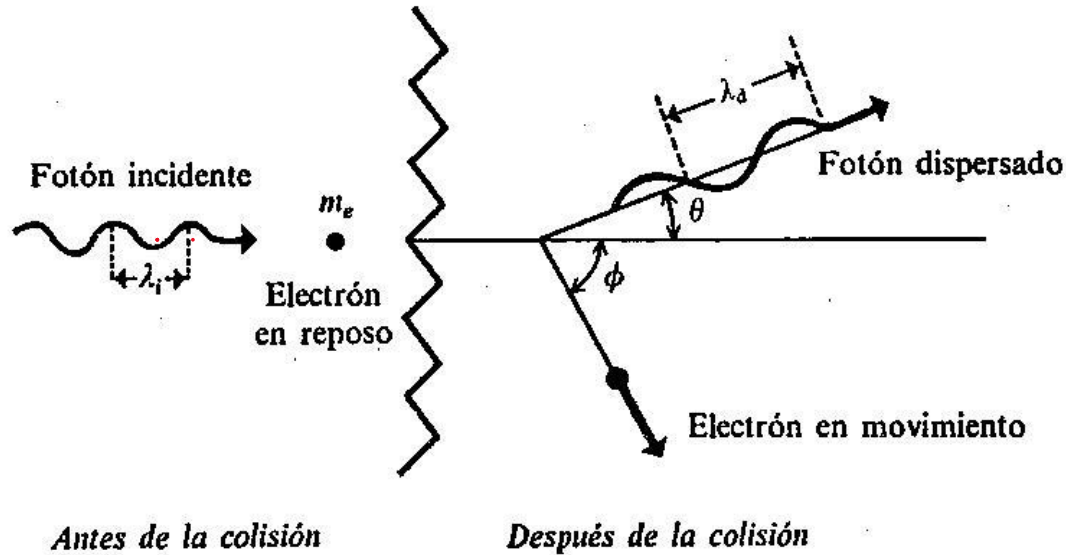
$$c = \lambda\nu$$

Por otra parte:  $p_f = mc$  entonces

$$h\nu = p_f c \rightarrow p_f = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$



# Efecto Compton y los fotones



Tomando en cuenta las ideas corpusculares de Einstein:

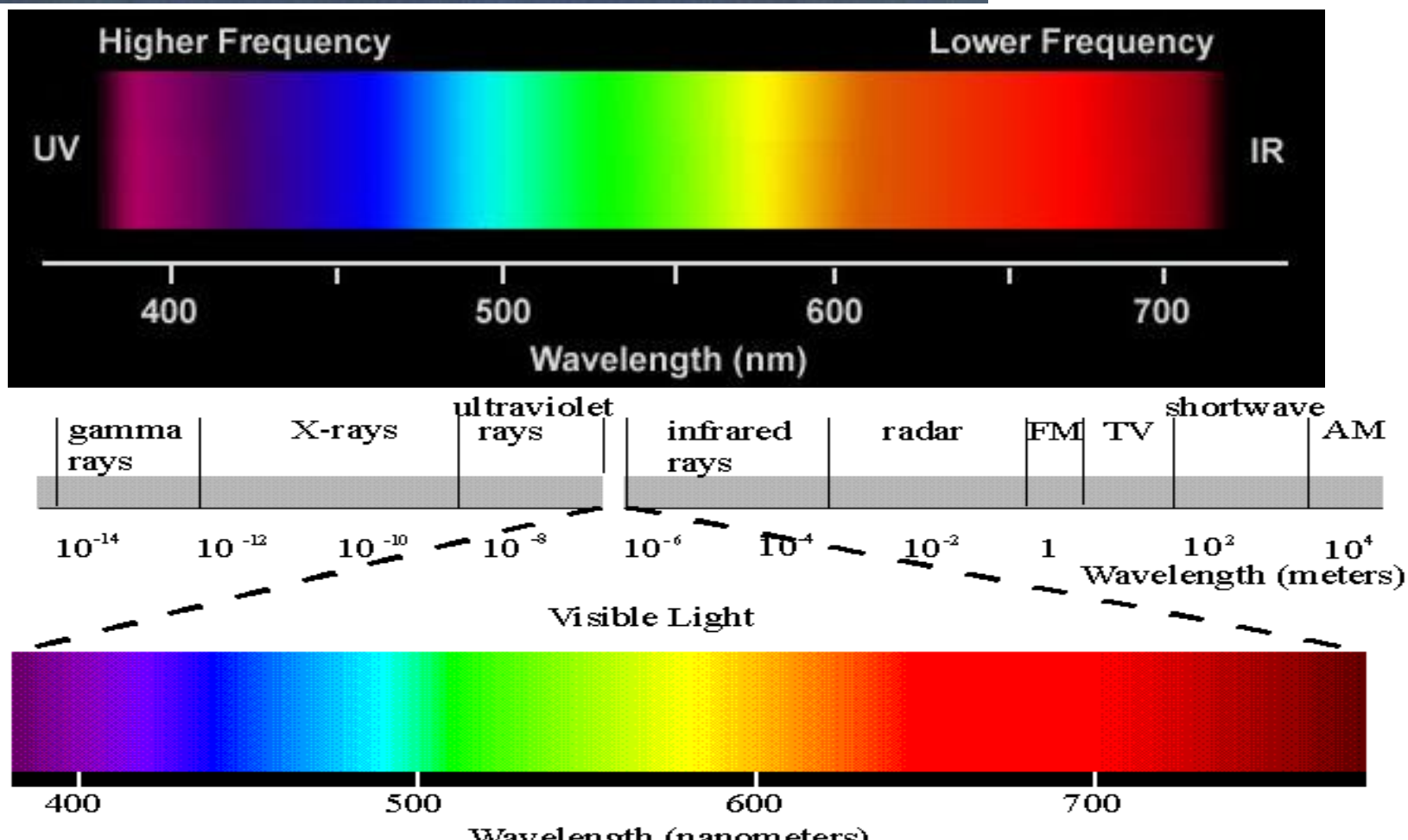
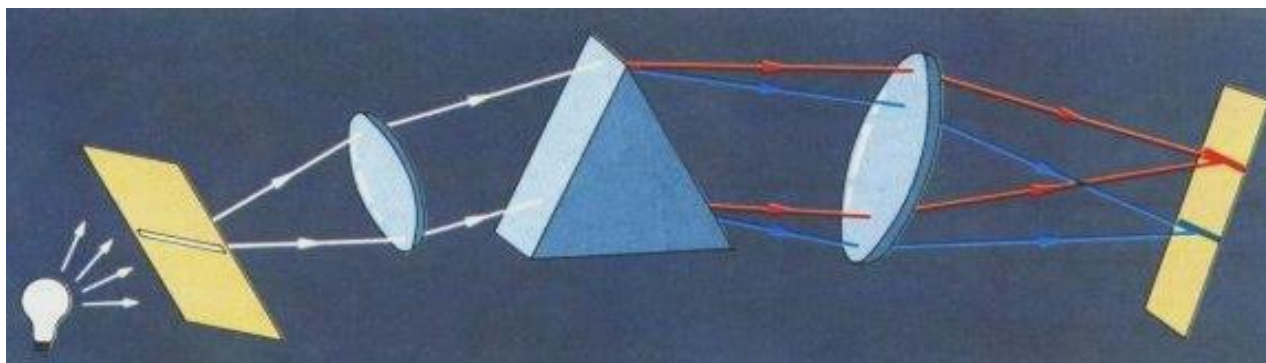
$$E_f = h \frac{c}{\lambda} \qquad p_f = \frac{h}{\lambda}$$

puede calcularse la diferencia de longitudes de onda como un problema de colisiones entre partículas.

$$\lambda_d - \lambda_i = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

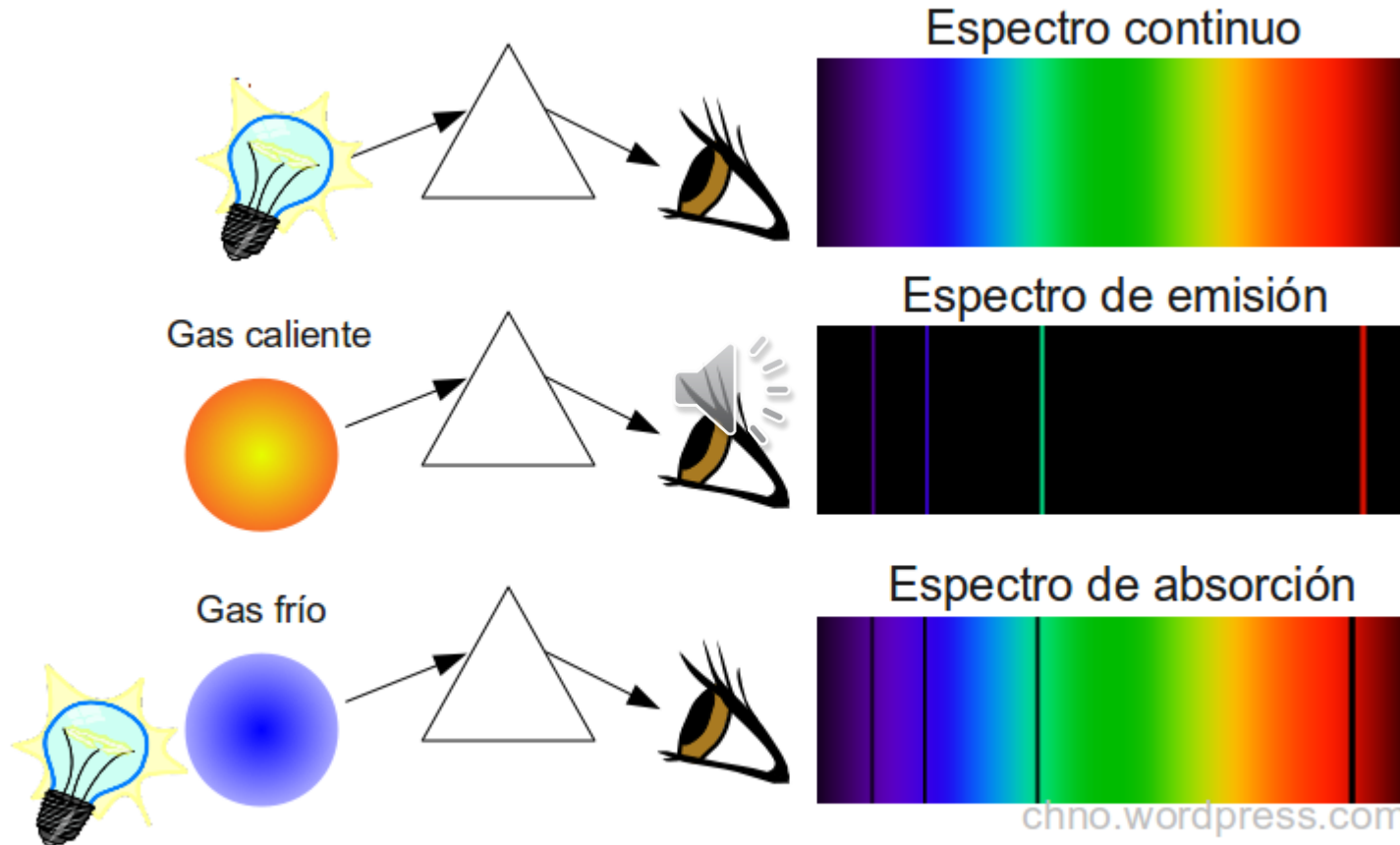


# El fundamento de la espectroscopía



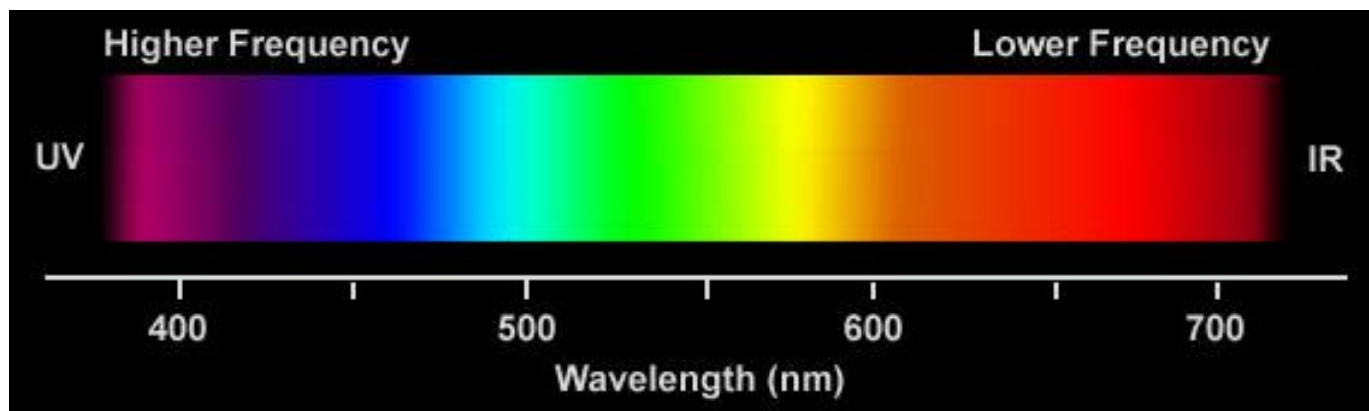


# Espectroscopías

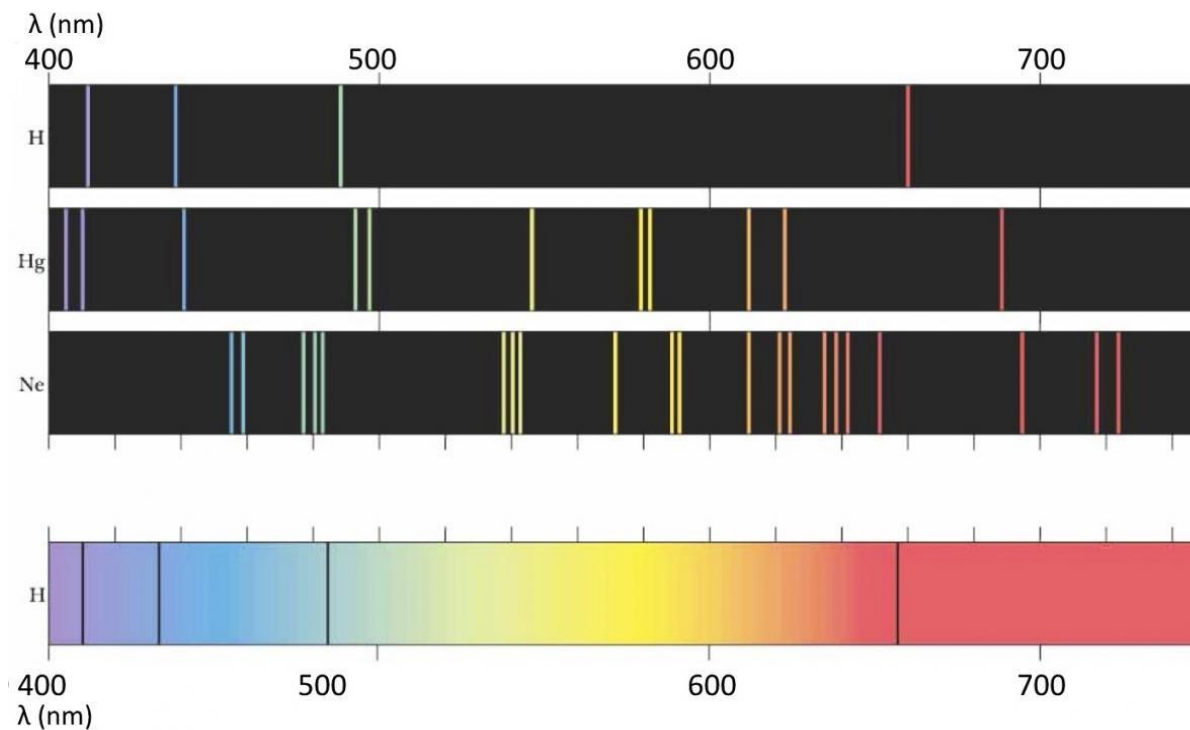




# Espectros de emisión y absorción de los elementos en la zona visible.



continuo



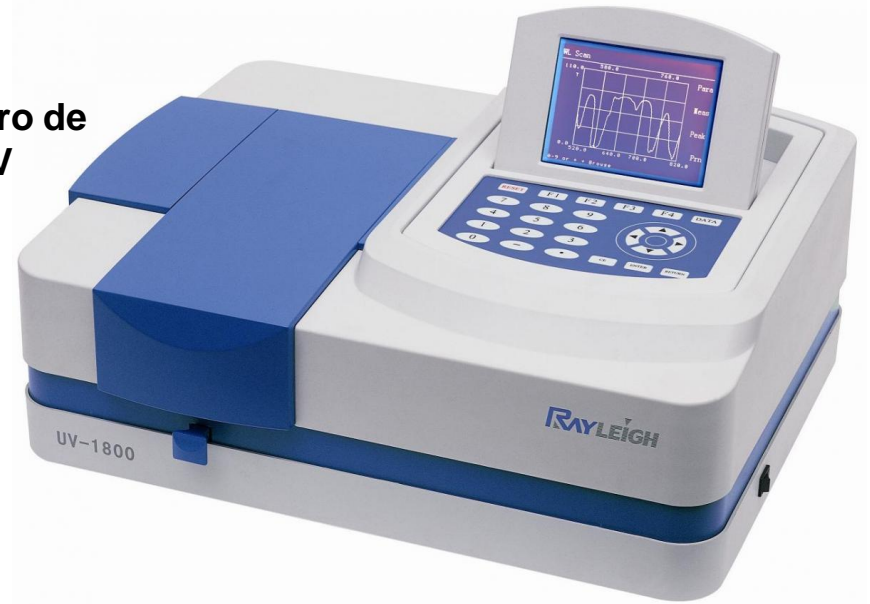
Espectros de  
emisión  
de  
H, Hg y Ne

Espectro de  
absorción del  
hidrógeno

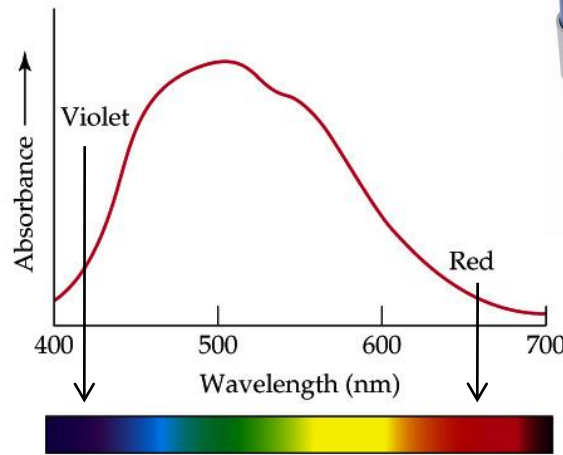


# Espectros de absorción

Espectrofotómetro de absorción UV

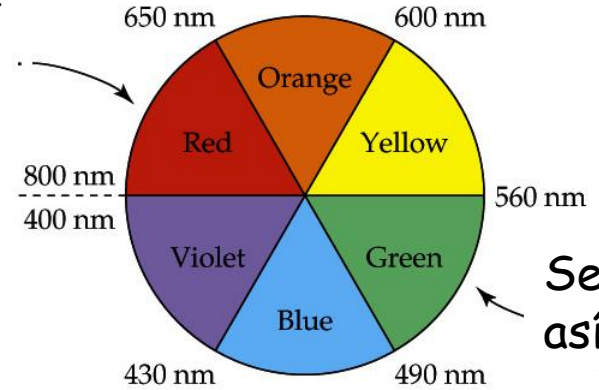


(a)



(b)

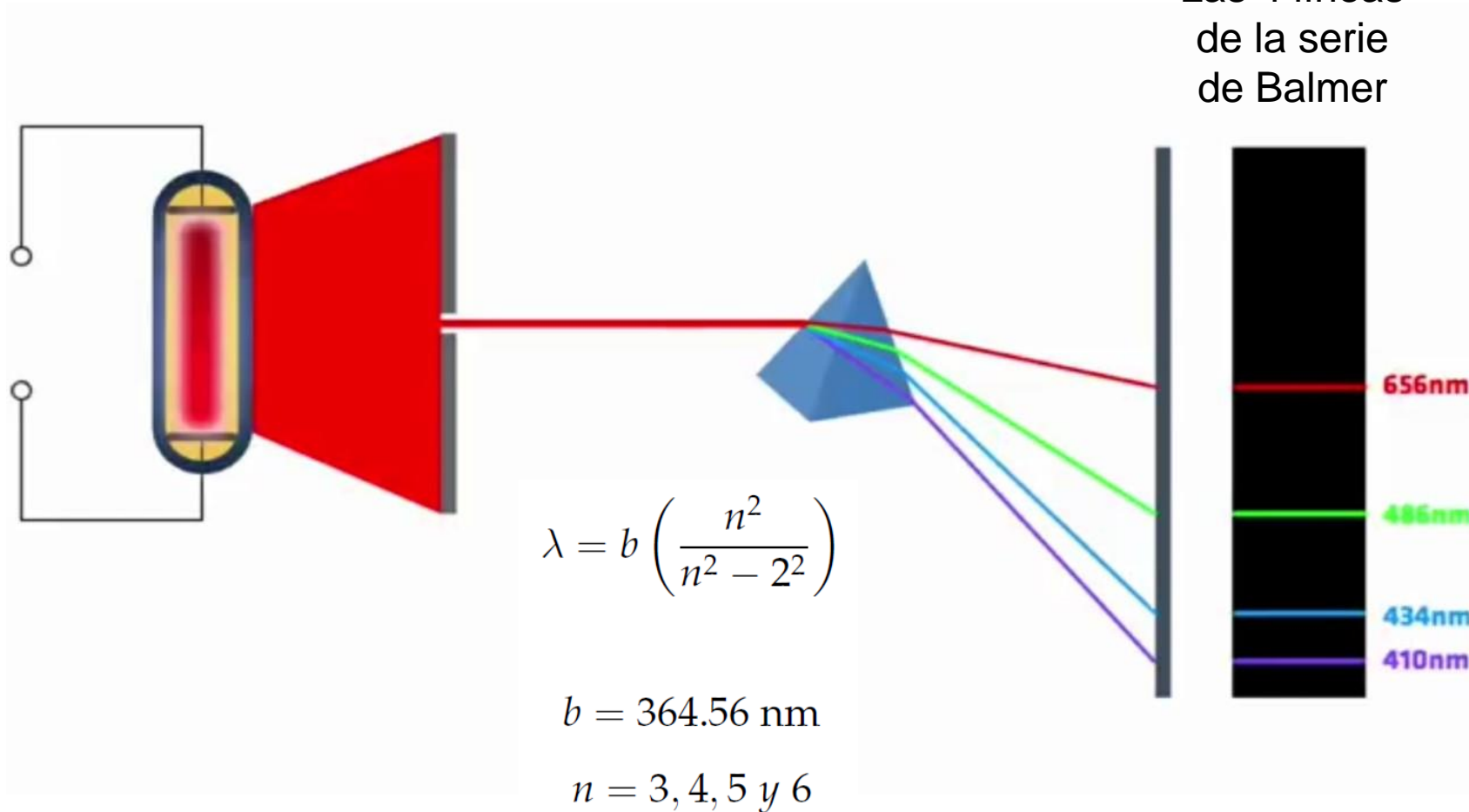
Si absorbe aquí





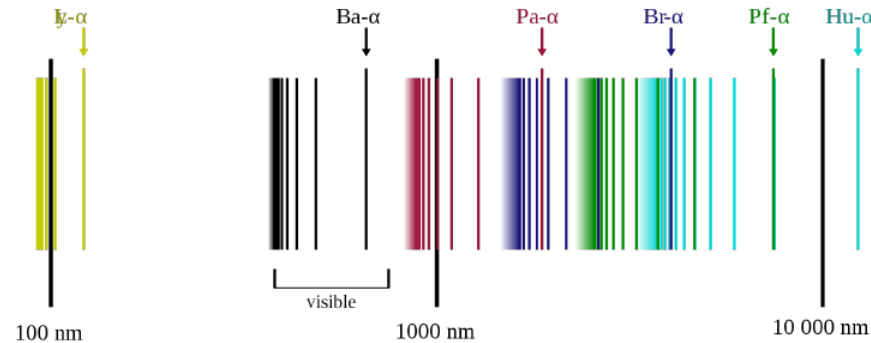


# Espectro de emisión de H en el visible.





# Espectro de emisión del hidrógeno completo.



- En 1890 Robert Rydberg:

$$\bar{\nu} = R_H \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$$n_1, n_2 = 1, 2, 3 \dots$$

$$n_1 > n_2$$

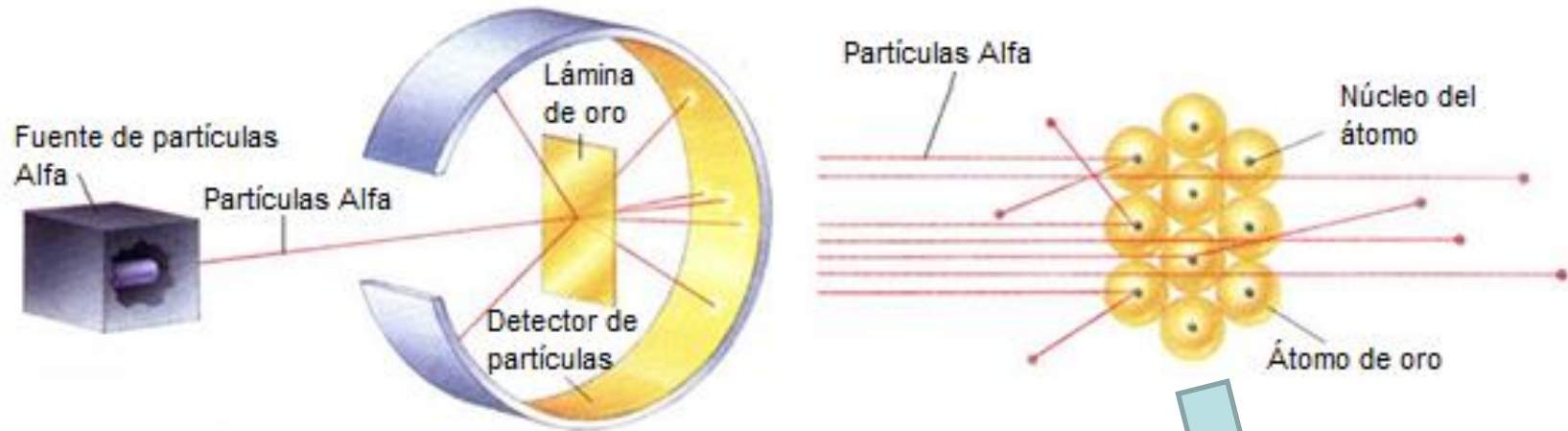
$$R_H = \frac{4}{b} = 109\,677.581 \text{ cm}^{-1}$$

número de onda

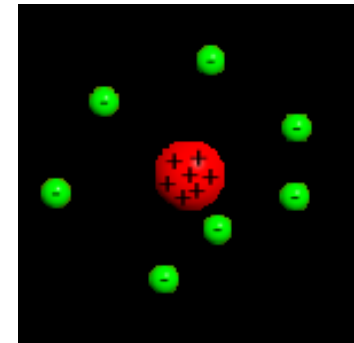
$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$



# El modelo de Rutherford de 1911.

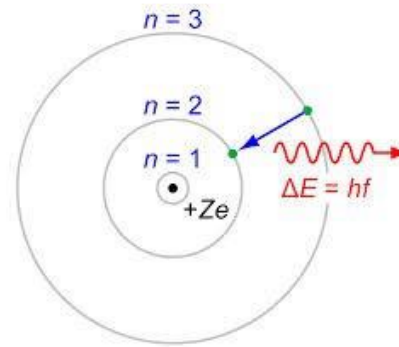


En 1911 este modelo se aceptaba con reservas porque las leyes físicas de la época indicaban que los electrones moviéndose alrededor del núcleo deberían irradiar ondas electromagnéticas pues eran cargas eléctricas sometidas a la aceleración centrípeta.





# Postulados de Bohr



En 1913, Niels Bohr desarrolló su célebre modelo atómico planetario que después presentaría de acuerdo a tres postulados fundamentales:

1º Los átomos monoeléctricos (H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>...) consisten de un núcleo de carga +Ze con una masa M que es A veces mayor que la del electrón (Ej.: M<sub>H</sub>= 1836.1m<sub>e</sub>)

2º El momento angular o cantidad de movimiento angular (*L*) está cuantizado. Solo son posibles las órbitas para las cuales:

$$L = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

3º Las órbitas del electrón son **estacionarias**. Solo cuando el átomo cambia de un estado inicial  $E_1$  de mayor energía a otro estado  $E_2$  de menor energía, emite radiación monocromática. La energía de esta radiación es:  $E_r = \Delta E = E_1 - E_2 = h\nu$

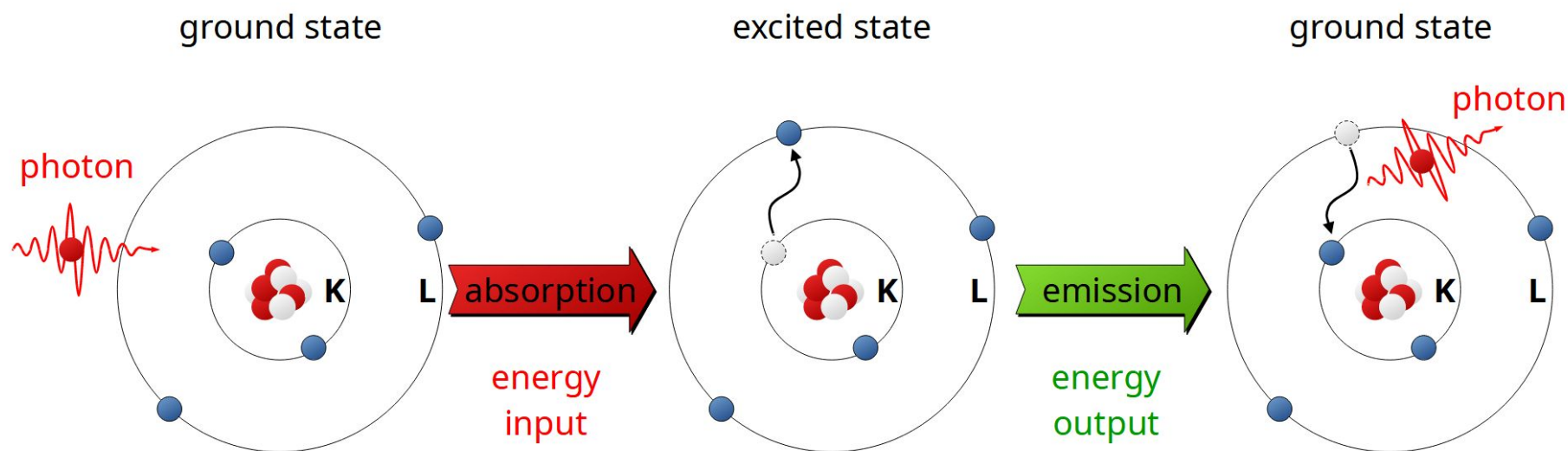
- La segunda hipótesis asume que el valor mínimo de  $n$  es 1. Este valor corresponde a un mínimo radio de la órbita del electrón de 0,0529 nm. A esta distancia se le denomina *radio de Bohr* ( $a_0$ ). Un electrón en este nivel fundamental no puede descender a niveles inferiores emitiendo energía.



# El modelo de Bohr



$$E_n = -\frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2n^2 \hbar^2} = -2.18 \frac{Z^2}{n^2} \text{ aJ} = -13.65 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$$



<https://www.tec-science.com/chemistry/atomic-models/bohr-atomic-model/>

No confundir el símbolo para la velocidad ( $v$ ) con la letra griega que se emplea para la frecuencia ( $\nu$ )



# El modelo de Bohr

Clásica    Cuántica

$$L = mvr = n\hbar$$

$$mvr = \frac{kZe^2}{v}$$

$$n\hbar = \frac{kZe^2}{v}$$

$$v_n = \frac{kZe^2}{n\hbar}$$

$$r = \frac{kZe^2}{mv^2}$$

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{mkZe^2}$$

$$E_{tot} = E_c + V$$
$$E_{tot} = \frac{mv^2}{2} - k\frac{Ze^2}{r}$$

$$E_n = \frac{m \left[ \frac{kZe^2}{n\hbar} \right]^2}{2} - k \frac{Ze^2}{\left[ \frac{n^2\hbar^2}{mkZe^2} \right]}$$

$$E_n = -\frac{k^2Z^2e^4m}{2n^2\hbar^2}$$

$$v_n = 2.1810^6 \left( \frac{Z}{n} \right)$$

unidades: m/s

$$r_n = 0.529 \left( \frac{n^2}{Z} \right)$$

unidades: Å

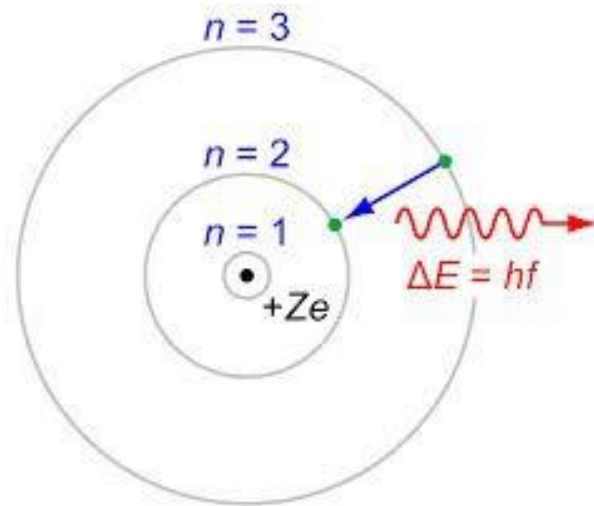
$$E_n = -2.1810^{-18} \left( \frac{Z^2}{n^2} \right)$$

unidades: J



# El modelo vs el experimento

$$c = \lambda\nu \quad \nu = \frac{c}{\lambda} \quad \lambda = \frac{c}{\nu} \quad \bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad \nu = c\bar{\nu} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$



$$E_n = -\frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2n^2 \hbar^2}$$

$$\Delta E = E_1 - E_2$$

$$E_1 - E_2 = h\nu = \frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$$\nu = \frac{2\pi k^2 Z^2 e^4 m}{2h^3} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

Aquí se ha remplazado  $\hbar$  por  $h/2\pi$

$$\bar{\nu} = \frac{2\pi k^2 Z^2 e^4 m}{ch^3} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

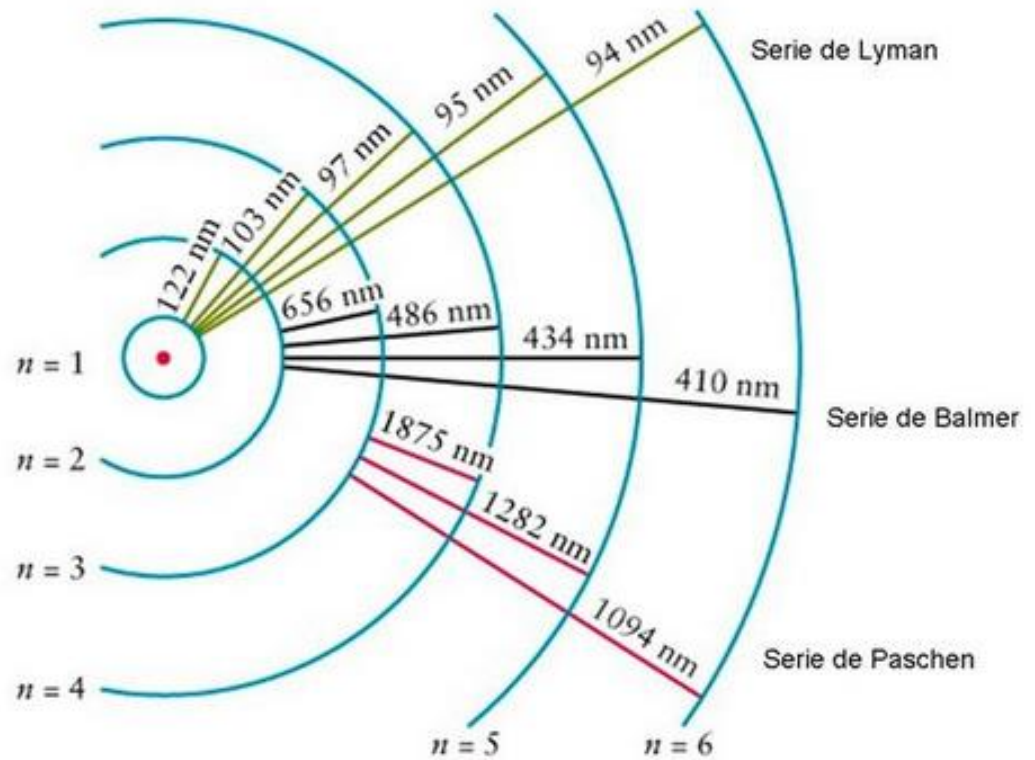
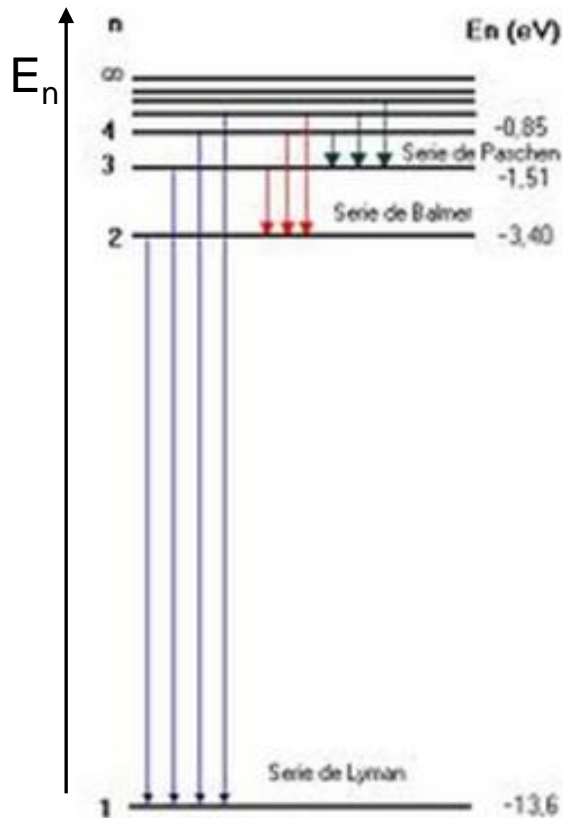
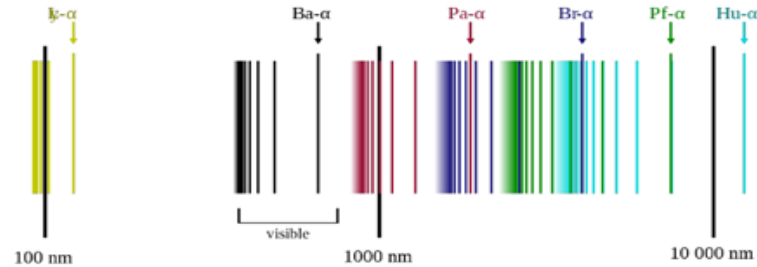
$$\curvearrowright R_H = 109\,737.32 \text{ cm}^{-1}$$

Esto provocó que el modelo de Bohr fuera aceptado ya que derivó la ecuación empírica de Rydberg con una desviación del 0.05%.



# El modelo de Bohr

$$E_n = \frac{-13,64 \cdot Z^2}{n^2} \text{ (eV)}$$





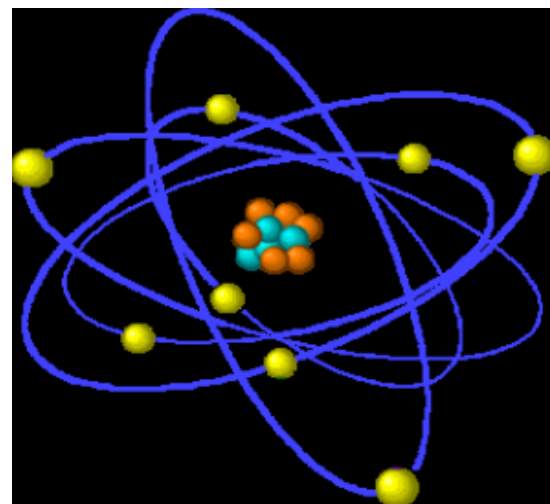
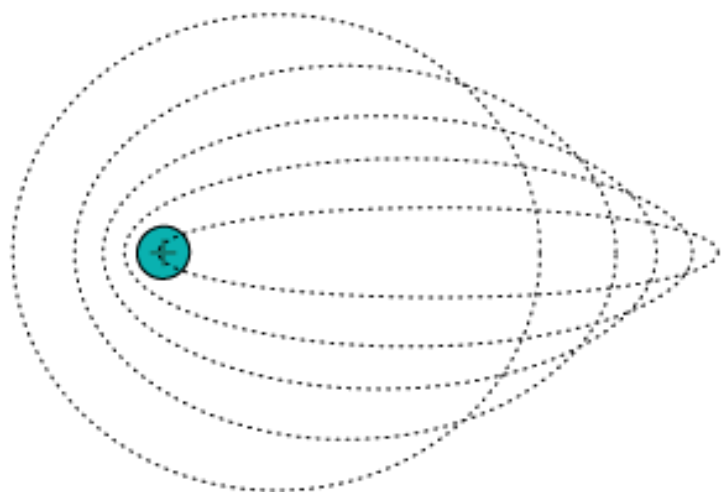
# Algunas constantes

- $c = 299\,792\,458\text{ m s}^{-1}$
- $e = 1.6022 \times 10^{-19}\text{ C}$
- $h = 6.6262 \times 10^{-34}\text{ J s}$
- $\hbar = 1.0546 \times 10^{-34}\text{ J s}$  ( $\hbar = h/2\pi$ )
- $k = 8.99 \times 10^9\text{ Nm}^2/\text{C}^2$  ( $k = 1/4\pi \epsilon_0$ )
- $\epsilon_0 = 8.854188 \times 10^{-12}\text{ C}^2\text{J}^{-1}\text{m}^{-1}$
- $R_H = 109\,677.581\text{ cm}^{-1}$



# Limitaciones del modelo

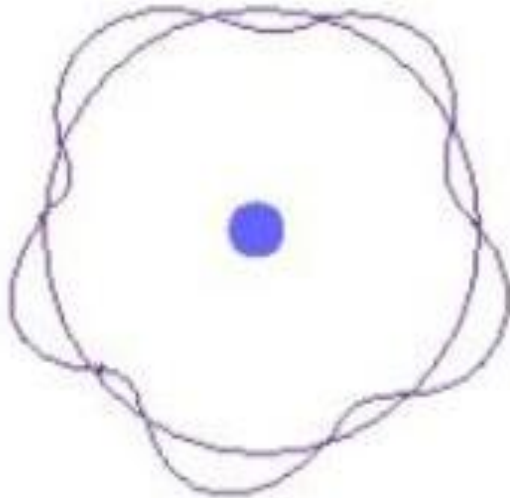
- Solo funciona en especies hidrogenoides (átomos que tengan solo un electrón).
- No explica los espectros de átomos polielectrónicos.
- No explica la estructura fina del espectro de emisión del hidrógeno.
- No explica el efecto Zeeman (dobletes en espectros obtenidos en presencia de campos magnéticos).
- Se requería de un nuevo modelo.
- En 1915 Sommerfeld y Wilson propusieron nuevas reglas de cuantización aplicables a un modelo de órbitas elípticas restringidas empleando dos números cuánticos en lugar de uno solo.





# La hipótesis de de Broglie

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



L.V. de Broglie  
31 años

$$2\pi r = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\frac{2\pi r}{n} = \frac{h}{p}$$

$$mvr = n \left( \frac{h}{2\pi} \right) = n\hbar$$

Esta es la cuantización de Bohr para el momento angular  $L$ .

¿Lo recuerdan?

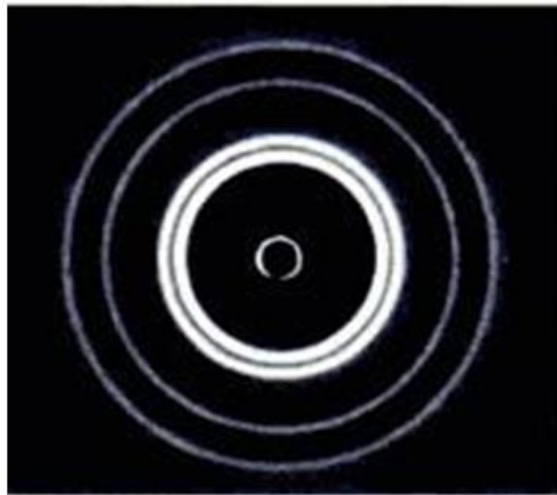
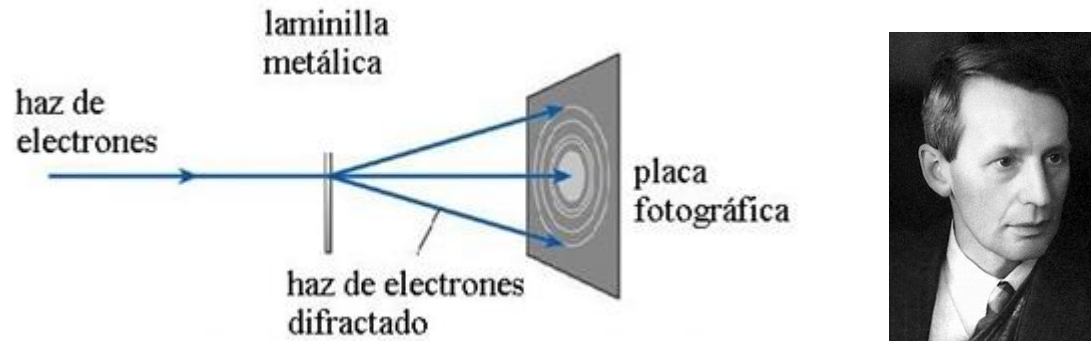
(vean diapositiva 32)

Introdujo la idea de **ondas piloto** estacionarias.



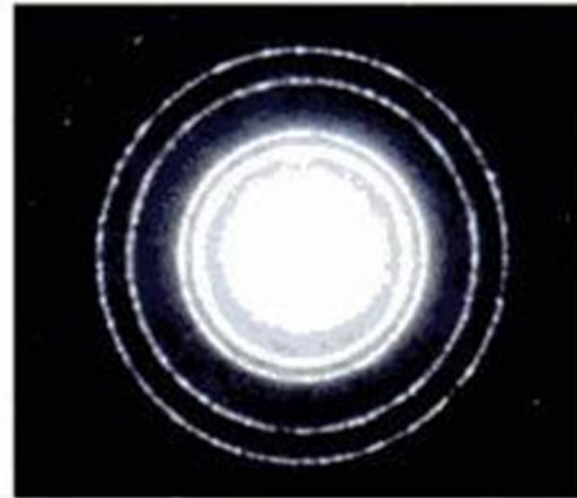
# Confirmación experimental de la hipótesis

C.J. Davisson y L.H. Germer en EU (1926) hicieron experimentos de difracción de electrones en Ni. Paralelamente, G.P. Thomson en UK los hizo en Au.



(a)

Patrón de difracción de Rayos X en aluminio



(b)

Patrón de difracción de electrones en aluminio



## El experimento de doble rendija

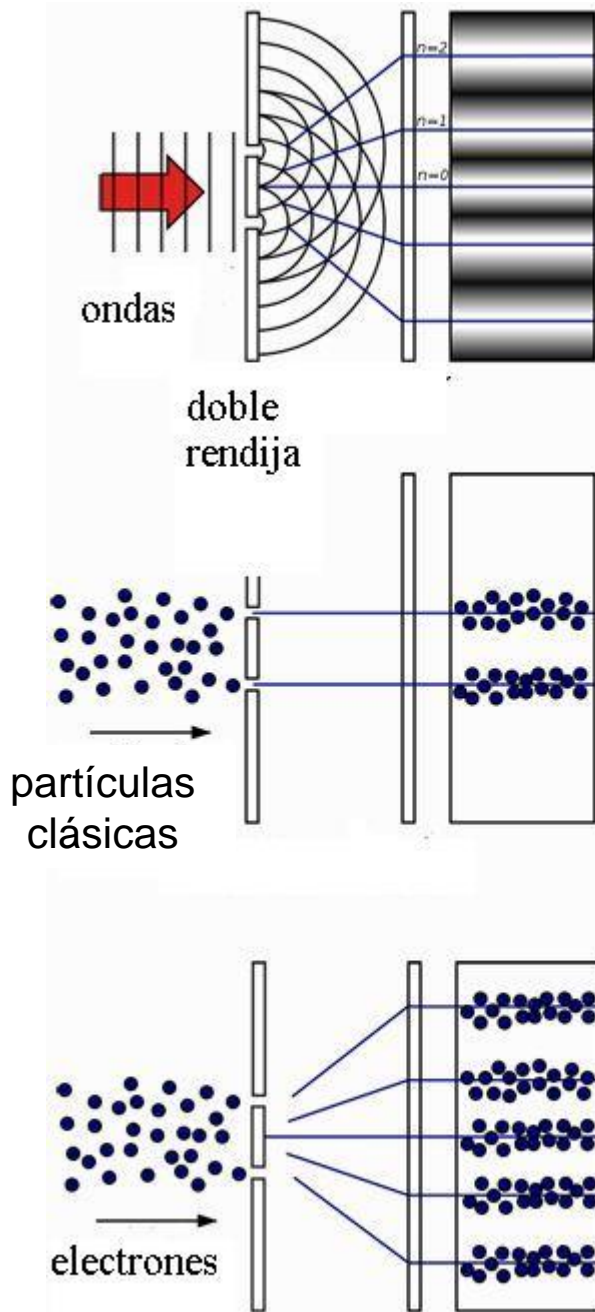
El experimento de doble rendija se puede ejemplificar con los esquemas siguientes:

- paso de ondas
- paso de partículas clásicas
- paso de electrones

Tanto las ondas electromagnéticas como los electrones se difractan al atravesar las rendijas.

Esto indica que ambos manifiestan carácter ondulatorio.

Por eso tanto al fotón como al electrón se les considera: ***ondas-partículas***.





# Relaciones de incertidumbre

- Heisenberg propuso este principio en 1927 aplicable a variables conjugadas.

- $(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \hbar/2$
- $(\Delta \alpha)(\Delta L_\alpha) \geq \hbar/2$
- $(\Delta E)(\Delta t) \geq \hbar/2$



W. Heisenberg  
24 años

- Las expresiones entre los paréntesis se refieren a la desviación estándar o incertidumbre del operador mecánico cuántico correspondiente.



# Algunas consecuencias de las relaciones de incertidumbre

- Es imposible asignar trayectorias a los electrones.
- A nivel macroscópico este principio es indetectable.
- Explica la existencia de la ***energía de punto cero***.



# La ecuación de Schrödinger

## La ecuación dependiente del tiempo

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \mathcal{V} \right\} \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$$

## La ecuación independiente del tiempo

La función de onda

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + \mathcal{V} \right\} \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$



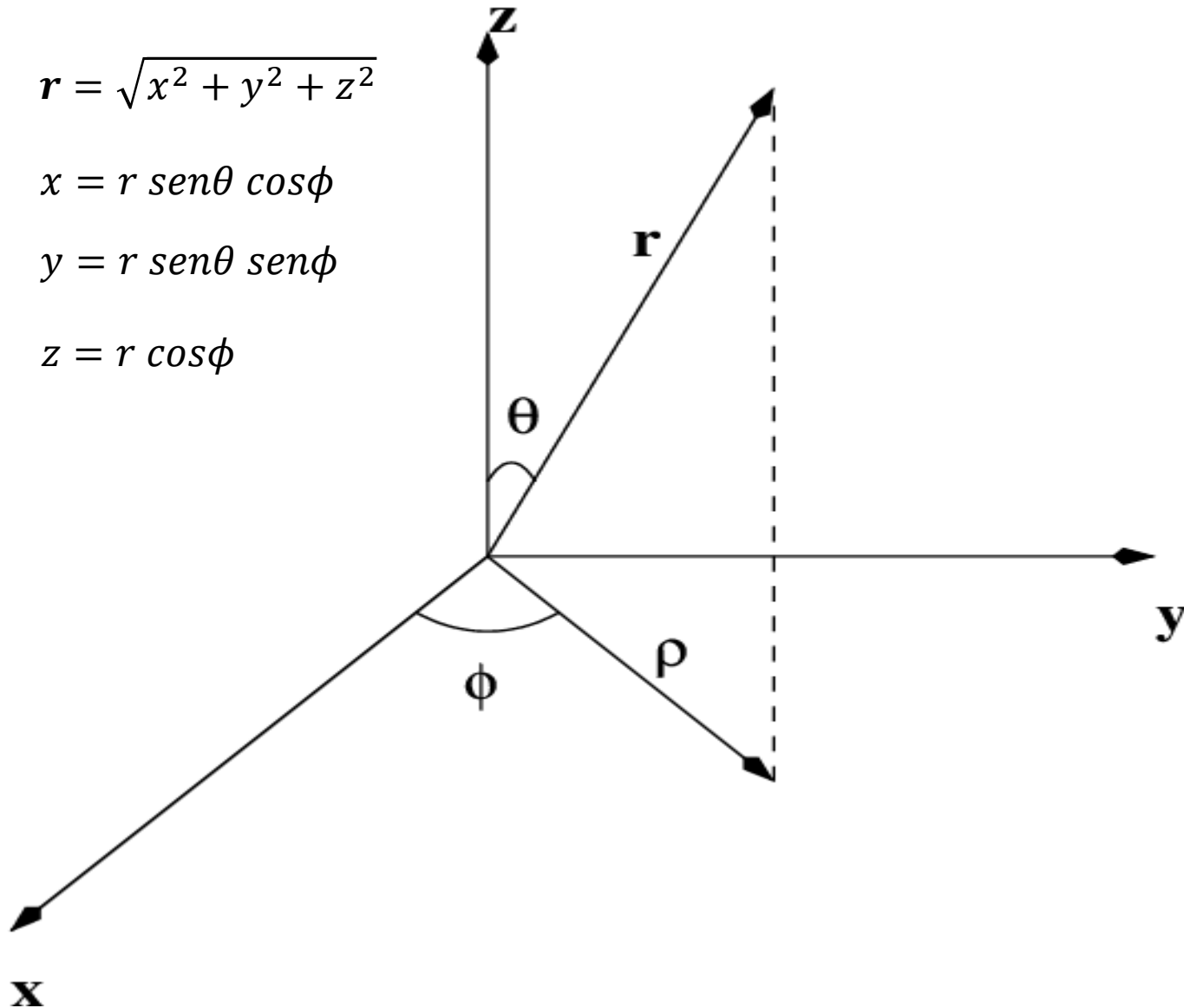
# Coordenadas esféricas

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$x = r \operatorname{sen}\theta \cos\phi$$

$$y = r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi$$

$$z = r \cos\phi$$





# Las soluciones de la ecuación de Schrödinger

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

La función de onda

La parte radial de la función de onda

La parte angular de la función de onda

La función de onda ( $\Psi$ ), aunque es fundamental, carece de significado físico.

Max Born en 1927 propuso que su cuadrado complejo puede interpretarse como una ***densidad de probabilidad***.





# La interpretación probabilística de la función de onda $\Psi$ .

$$\Psi$$

La función de onda

$$\Psi^2 = |\Psi\Psi^*| = \frac{dP}{dV} = \rho \quad \boxed{\rho = \frac{dP}{dV}} \quad P(V) = \int_V \rho dV = \int_V \Psi^2 dV$$

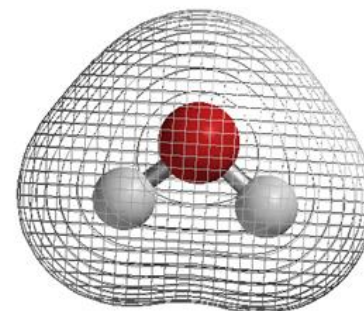
Densidad de  
probabilidad

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^2 dV = 1$$

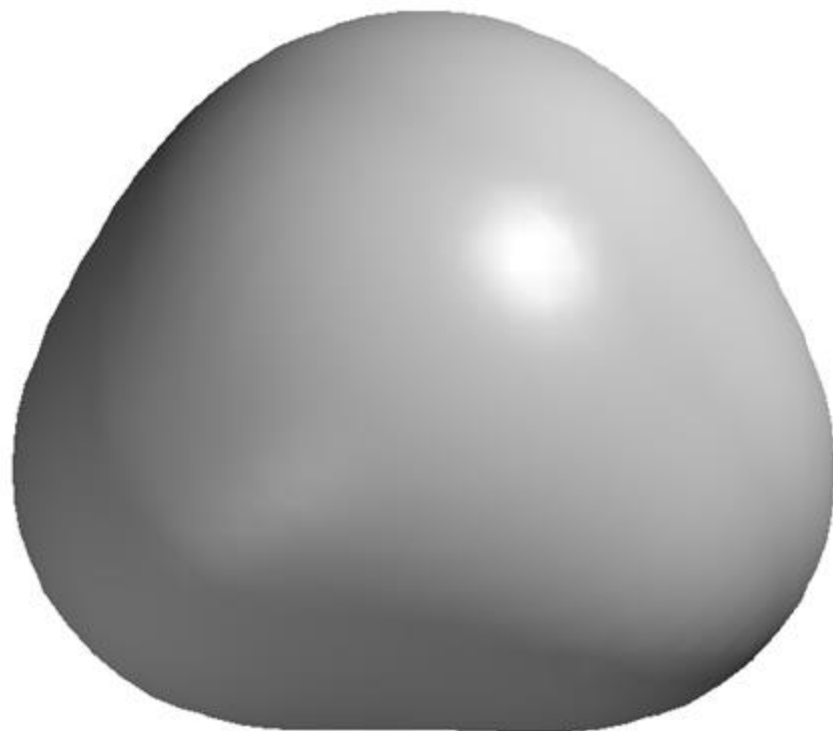
Condición de normalización



# H<sub>2</sub>O: densidad electrónica



Mapa de contornos de la densidad electrónica  $\rho$

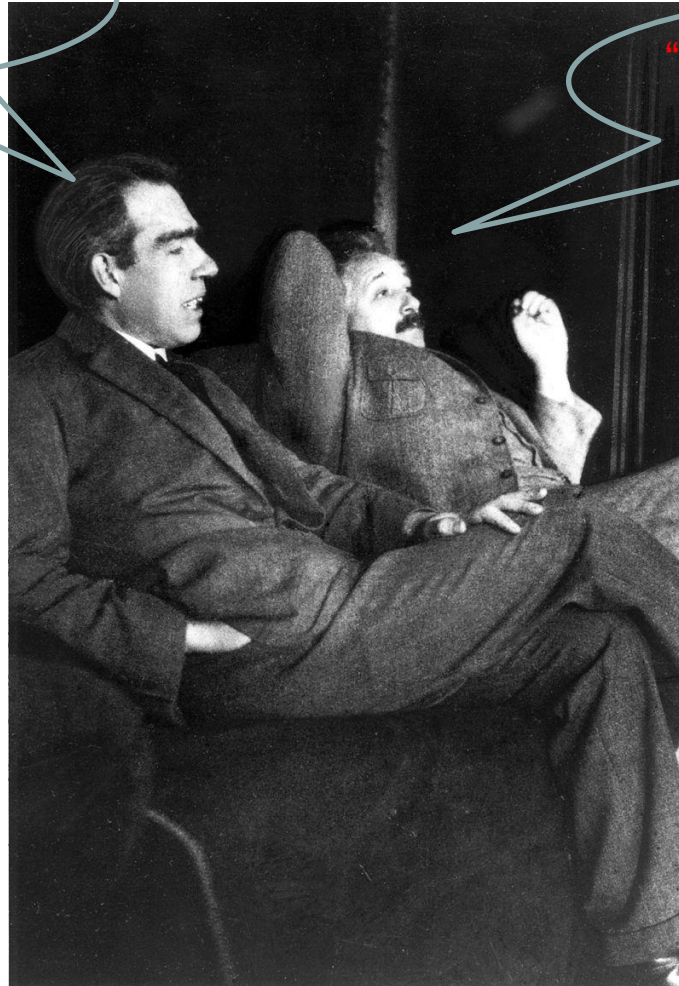


Isosuperficie de la densidad electrónica  $\rho$



# Una charla probable

“Albert, deja de decirle a Dios cómo usar sus dados”



“No creo que Dios juegue a los dados con el Universo”

## Otros temas:

- Escuela de Copenhage
- Principios de: complementareidad y de correspondencia.
- Entrelazamiento cuántico.
- Experimentos de Aspen

Bohr y Einstein adoptaron diferentes puntos de vista sobre cómo interpretar los resultados de la mecánica cuántica.



# La nueva física

- Hemos visto la profunda transformación de las leyes de la física que ocurrió en la transición del siglo XIX al XX.
- Estos cambios permitieron interpretar mejor muchos hechos de la Química.
- Resulta interesante que, en algunos temas, los químicos con sus métodos se adelantaron a los físicos.
- Ambas disciplinas se complementan.