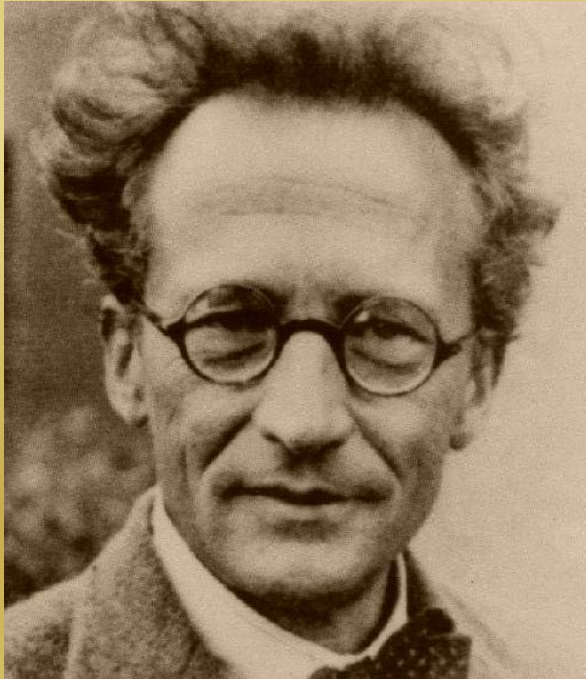




La ecuación de Schrödinger: una ecuación diferencial que revolucionó la física

M.T.Barriuso
Dpto. Física Moderna
Universidad de Cantabria

Índice

1.- La Física en 1900

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

3.- El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

La ecuación de Schrödinger. Propiedades

1.- La Física en 1900

- ✓ Finales del siglo XIX:
 - ⇒ Física clásica muy bien establecida
 - ⇒ estabilidad política y expansión económica, pero...
- ✓ Hacia 1900: cambios revolucionarios
 - ⇒ política → primera guerra mundial, revolución rusa,...
 - ⇒ bellas artes → del clasicismo al arte moderno
 - ⇒ sicología → teorías freudianas
 - ⇒ Y en la Física?
- ✓ La Física clásica explicaba todos los experimentos excepto...
 - ⇒ ¿Propagación de ondas EM necesita un medio? (no detectado experimentalmente)
 - ⇒ Radiación emitida por un cuerpo caliente
 - ⇒ Espectros atómicos
 - ⇒ Emisión de electrones por superficies iluminadas con una luz

Parecían poco
significativos
pero..

Teoría de la
relatividad especial
Teoría cuántica

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Nacimiento de la Física Cuántica

14 de Diciembre de 1900

Max Planck en la German
Physical Society



"On the theory of the Energy
Distribution Law of the Normal
Spectrum"

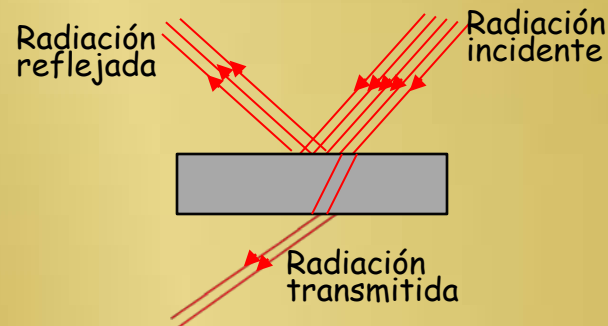
2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Radiación emitida por un cuerpo caliente

- ✓ Radiación emitida por un cuerpo en razón de su temperatura



No confundir con

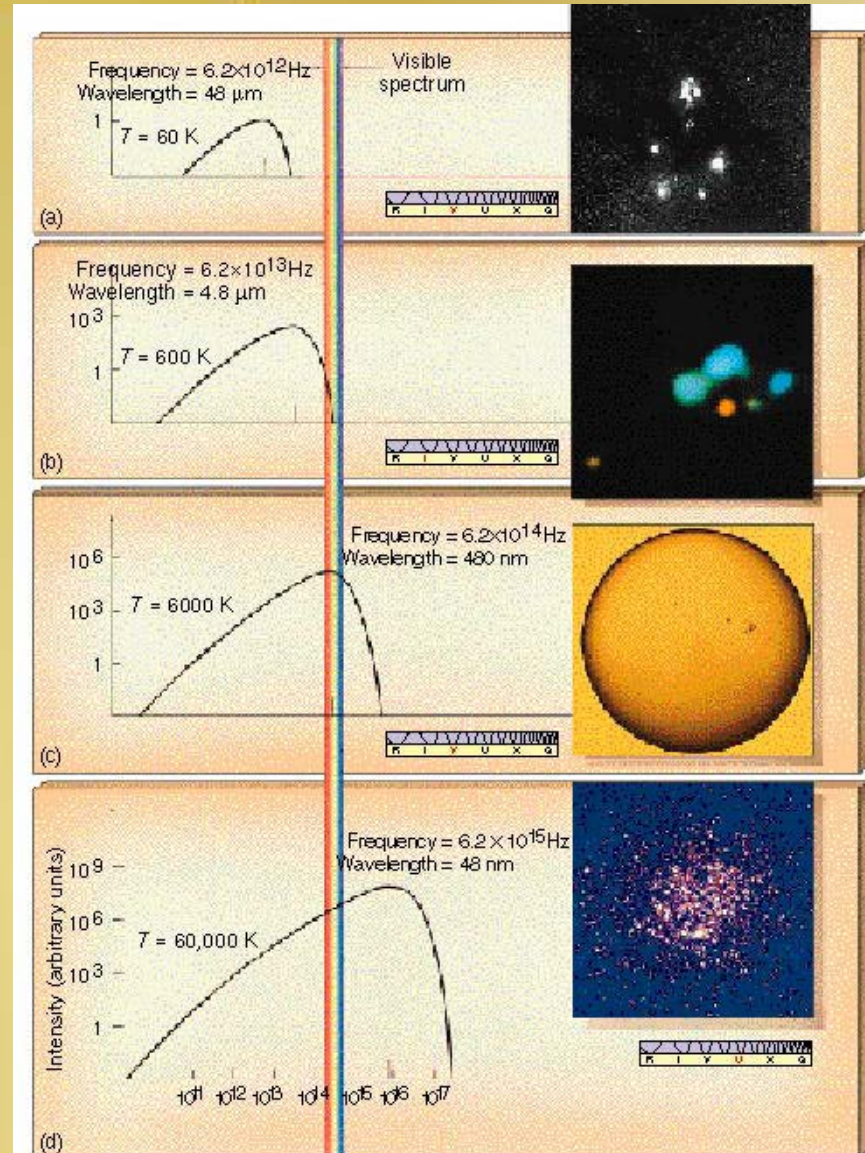


2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Radiación emitida por un cuerpo caliente

✓ Materia sólida o líquida:

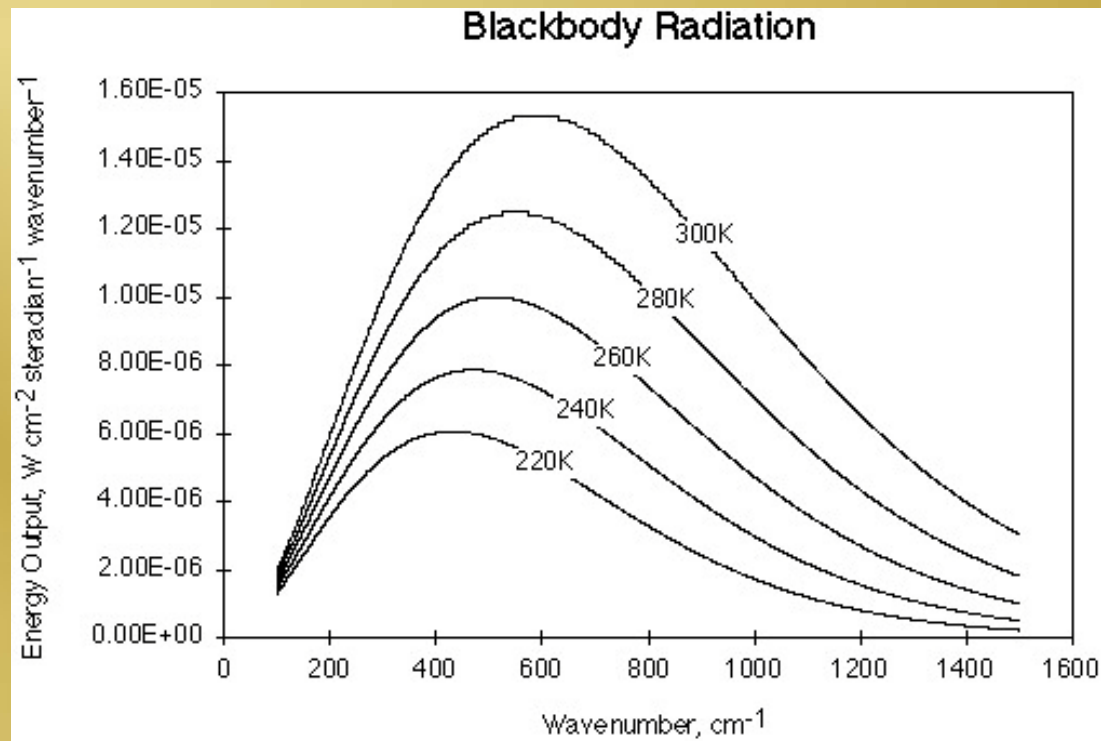
- Espectro continuo, casi independiente del tipo de material.
- Al aumentar la temperatura, el cuerpo emite más radiación térmica y la frecuencia de la radiación más intensa es más alta



2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Radiación emitida por un cuerpo caliente

Primeras medidas: Lummer y Pringsheim en 1899

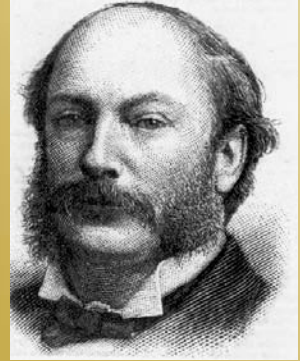


$$R_T(\nu) \longrightarrow \text{energía}/(\text{area} \cdot t \cdot \text{frec})$$

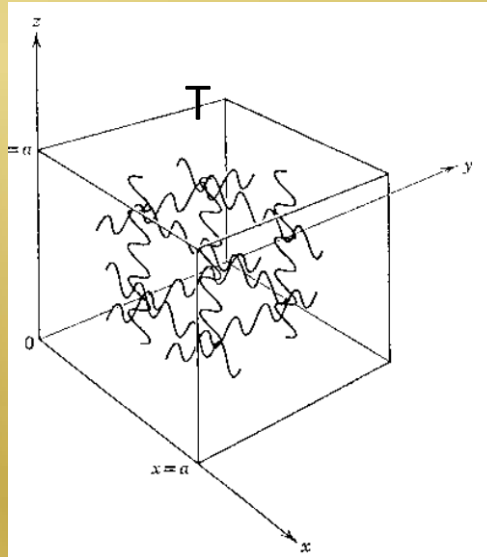
2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Radiación emitida por un cuerpo caliente

Teoría clásica de Rayleigh-Jeans (1900)



Cuerpo negro a
temperatura T

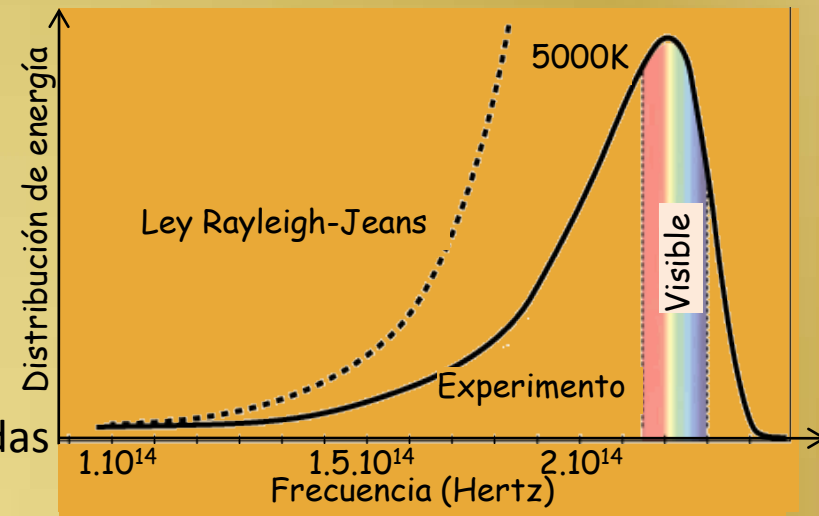


$$\rho_T(\nu) d\nu = \frac{8\pi \nu^2 kT}{c^3} d\nu$$

- a) Electromagnetismo: Ondas estacionarias
- b) Teoría cinética: Energía total media de estas ondas
- c) Ley de equipartición de la energía:

Energía cinética media por grado de libertad: $kT/2$.

Virial: $\langle \mathcal{E} \rangle = kT$



Catástrofe ultravioleta

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

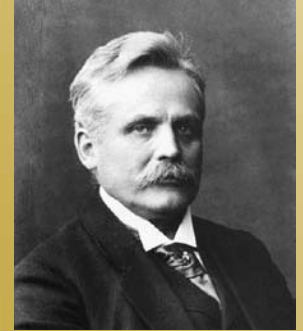
Radiación emitida por un cuerpo caliente

Wilhelm Wien 1893

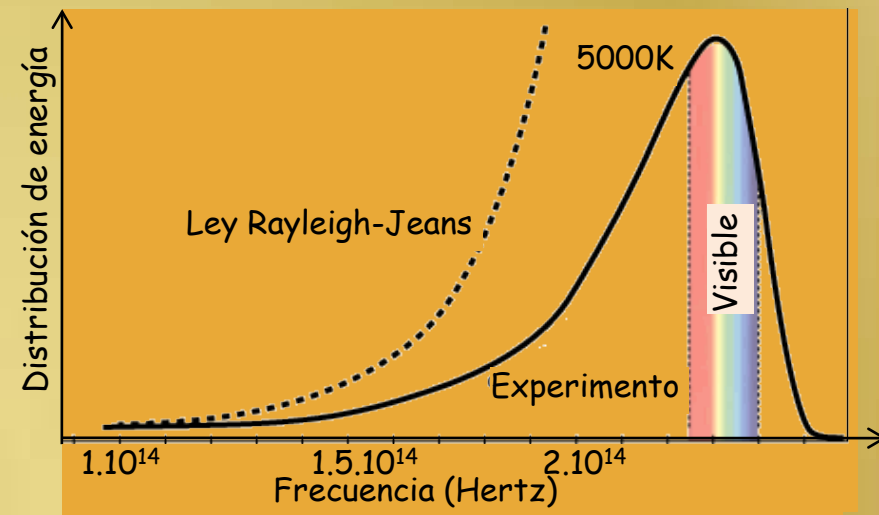
la curva experimental se ajusta a:

$$I(\nu) = \frac{C_1 \nu^3}{\exp(C_2 \nu)}$$

el fenómeno tiene un comportamiento muy distinto al previsto por la física clásica.



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



2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Radiación emitida por un cuerpo caliente

Max Planck 1900

Posible violación de la ley de equipartición de la energía ?

Suponemos $\langle \mathcal{E} \rangle \xrightarrow{\nu \rightarrow 0} kT$

A altas frecuencias debería ser

$$\langle \mathcal{E} \rangle \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} 0$$

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

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

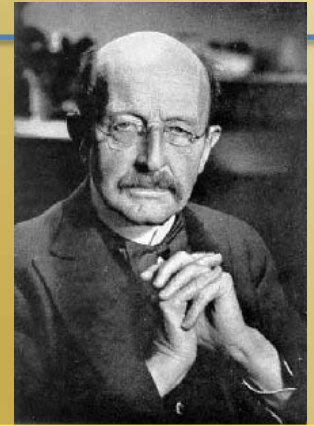
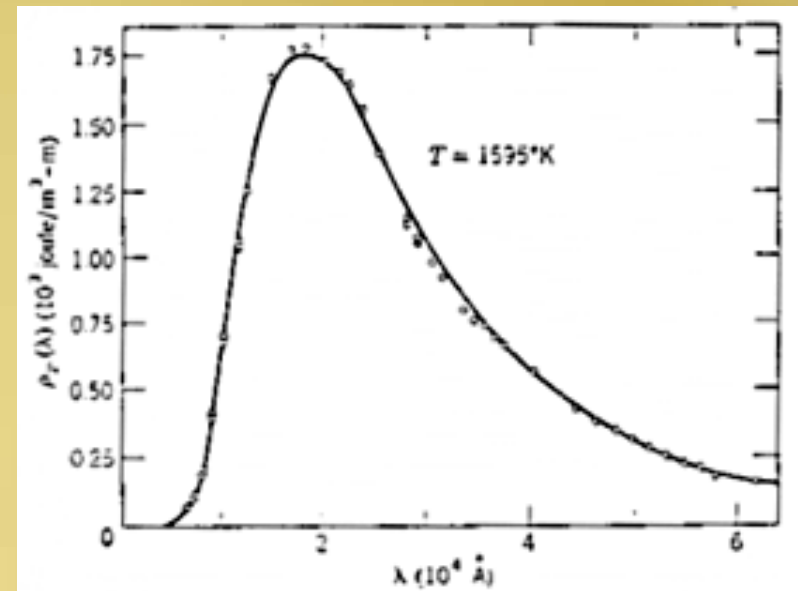
$$h = 6.57 \cdot 10^{-34} \text{ julios.seg.}$$

$$h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ julios.seg (actual).}$$

Hipótesis de Planck:

Solo valores discretos de $\mathcal{E}$: $0, h\nu, 2 h\nu, 3 h\nu \dots$

Coblentz (1916)

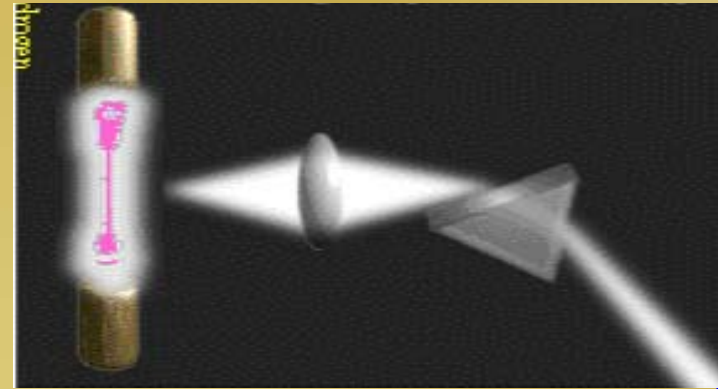


2.- Los primeros 25 años del siglo XX

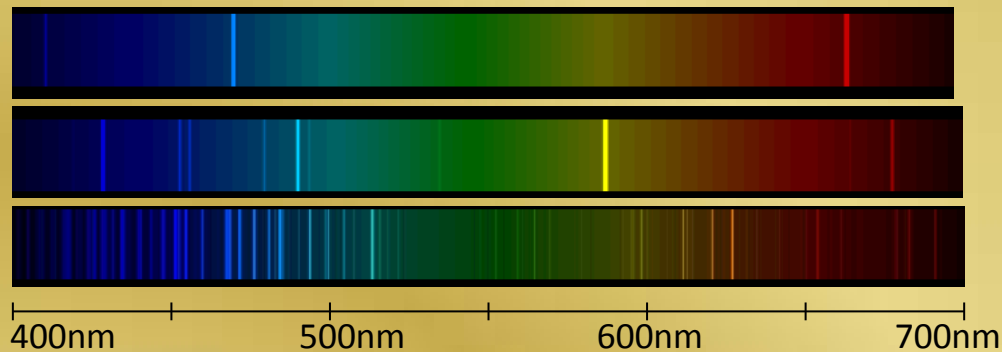
Espectros atómicos

Vapor o gas atómico

• Espectro de líneas de **emisión**



pantalla



H

He

Ar

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

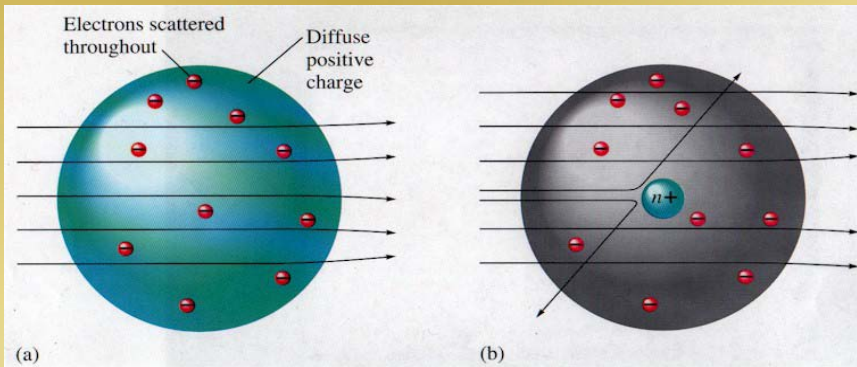
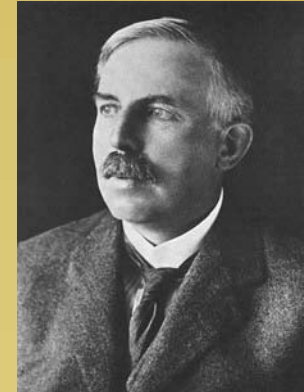
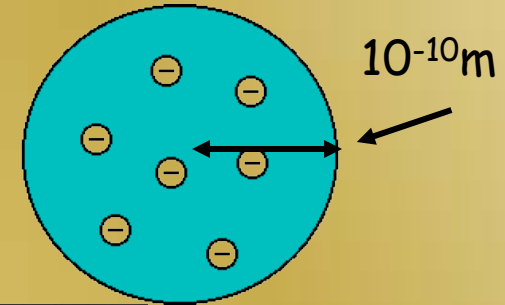
Espectros atómicos

Hasta finales del siglo XIX: la materia está formada por átomos (sin estructura conocida)

1897.- descubrimiento del electrón $\longrightarrow$ los átomos deben contener electrones

Rutherford
1911

J.J. Thomson
1898



átomo de Thomson átomo de Rutherford

Estimación de cargas nucleares:

La carga nuclear aumenta a lo largo de la tabla periódica

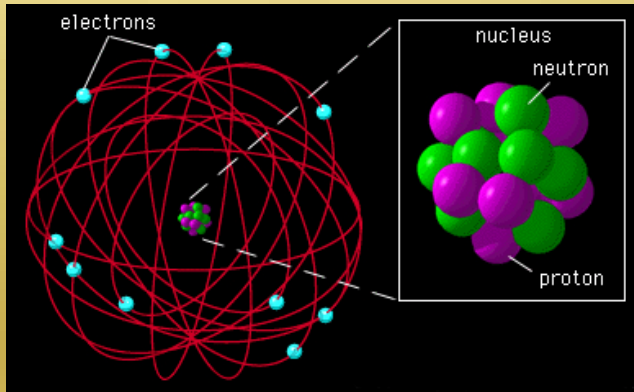
Las cargas nucleares siempre son múltiplos de $+e$

El $n^\circ Z$ de unidades de carga positiva = $N^\circ \text{ atómico} \Rightarrow n^\circ \text{ de protones}$

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Espectros atómicos

Rutherford 1911



- Usando la ley de Newton y la ley de Coulomb

- Átomo de H
$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} < 0$$

Energía de ionización experimental $E = -13.6 \text{ eV}$

$$r \approx 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad v \approx 2.2 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

- de acuerdo con la estabilidad experimental de los átomos
- no de acuerdo con la teoría electromagnética

Quantum mechanics

Ex 4.1.
ionization of electron in H
 $E = -13.6 \text{ eV} \rightarrow r = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 E} \approx 5.3 \times 10^{-11} \text{ m}$
 $v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}} = 2.2 \times 10^6 \text{ m/sec}$
 $\therefore v \ll c$

• failure of classical physics

The accelerated electron radiates in the form of em waves, then it loses energy and strikes on nucleus.
Rutherford model is ok.
But electron motion should be treated in QM

SVIL 6

Radiación de espectro continuo

Colapso del electrón sobre el núcleo

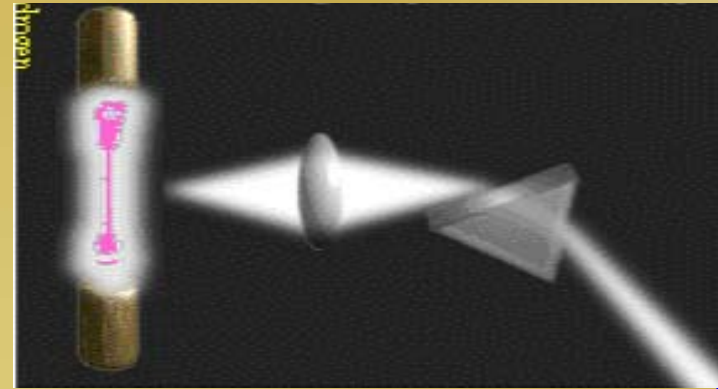
Pero los átomos son estables: fallo de las leyes clásicas a nivel microscópico

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

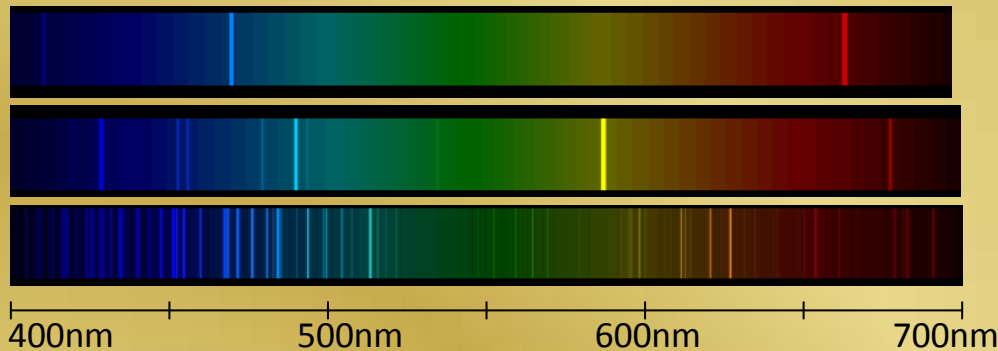
Espectros atómicos

Vapor o gas atómico

• Espectro de líneas de **emisión**



pantalla

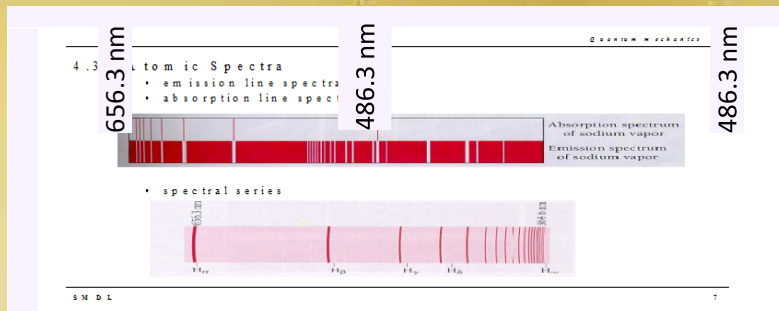


H

He

Ar

Serie de Balmer (1885)



$$\lambda(\text{\AA}) = 3646 \frac{n^2}{(n^2-4)}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n = 3, 4, \dots (H_{\alpha}, H_{\beta}, \dots)$$

$$R = 0.01097 \text{ nm}^{-1}$$

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Espectros atómicos

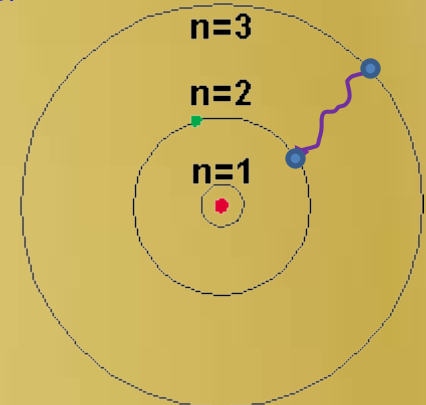
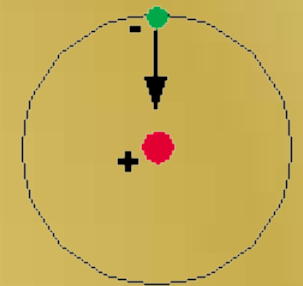
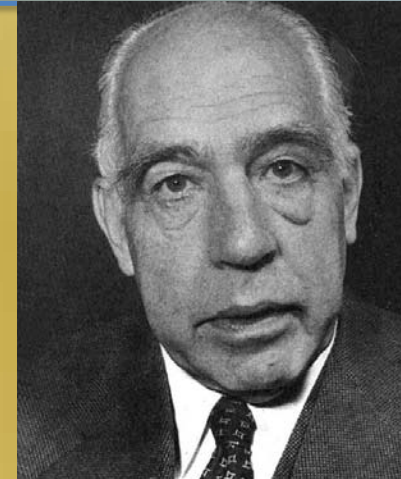
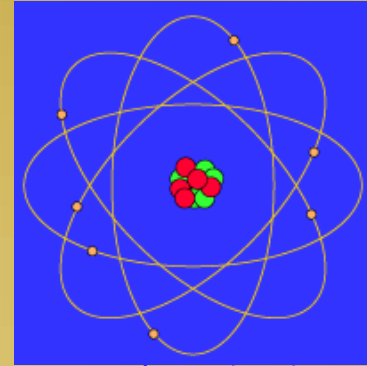
Bohr 1913

Postulados

- ✓ Electrones se mueven en órbitas circulares alrededor del núcleo (atracción coulombiana) bajo las leyes de la mecánica clásica
- ✓ Órbitas permitidas: mom. angular orbital $L = \text{múltiplo entero de } \hbar$
- ✓ Electrón aunque acelerado, no emite radiación electromagnética. Energía constante
- ✓ Radiación emitida cuando el electrón pasa de la órbita E_i a la E_f . La frecuencia ν emitida es $(E_i - E_f)/h$

Niveles de energía discretos: acuerdo con el espectro experimental (números cuánticos)

Franck y Hertz (1914): confirmación experimental



2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Espectros atómicos

Bohr 1913

Principales fallos del modelo de Bohr

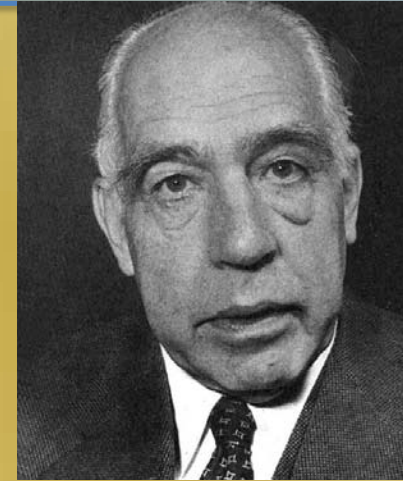
- Modelo "ad hoc"
- Solo explica el átomo de hidrógeno
- No explica la estructura fina

Intentos de corregirlo

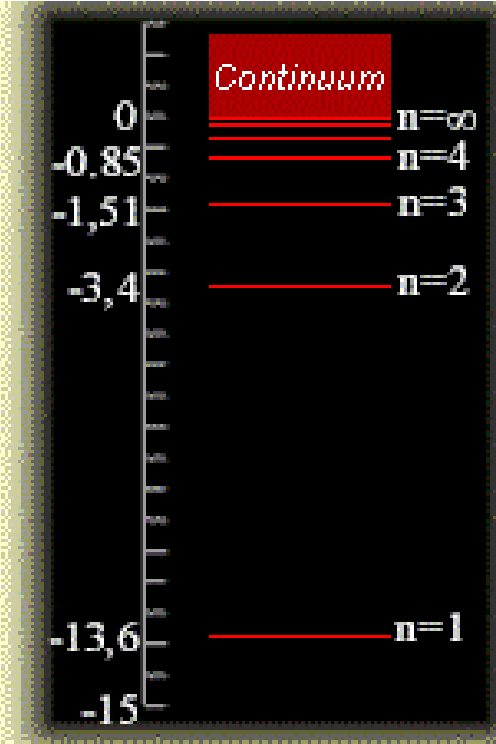
- Reglas de Sommerfeld y Wilson (1916): $\oint p_q dq = n_q h$
 - Explicación de la estructura fina
 - Cuantización incorrecta del oscilador armónico

- Principio de correspondencia Bohr 1923

La teoría cuántica $\rightarrow$ la física clásica en el límite de números cuánticos muy grandes o cuando $h \rightarrow 0$



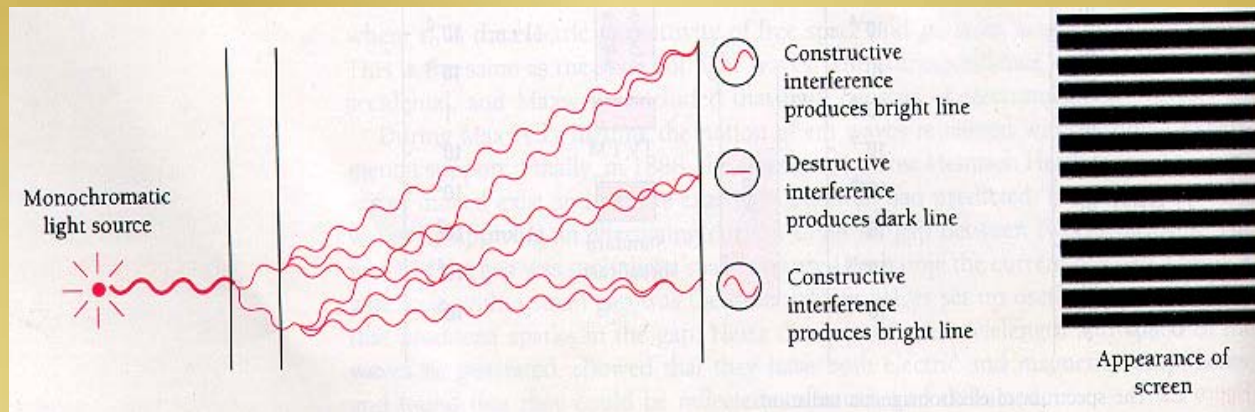
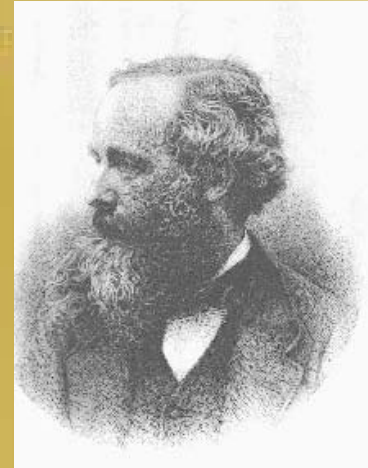
Bohr Premio Nobel 1922



2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Emisión de electrones por superficies iluminadas

- ✓ Hasta finales del siglo XIX la luz eran ondas electromagnéticas descritas por las ecuaciones de Maxwell
- ✓ Propiedades de las ondas EM
 - reflexión y refracción
 - absorción
 - difracción
 - p. superposición $\Rightarrow$ interferencias

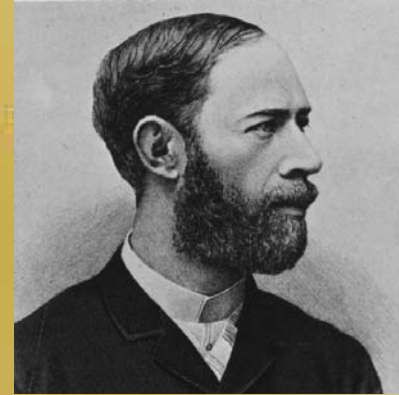
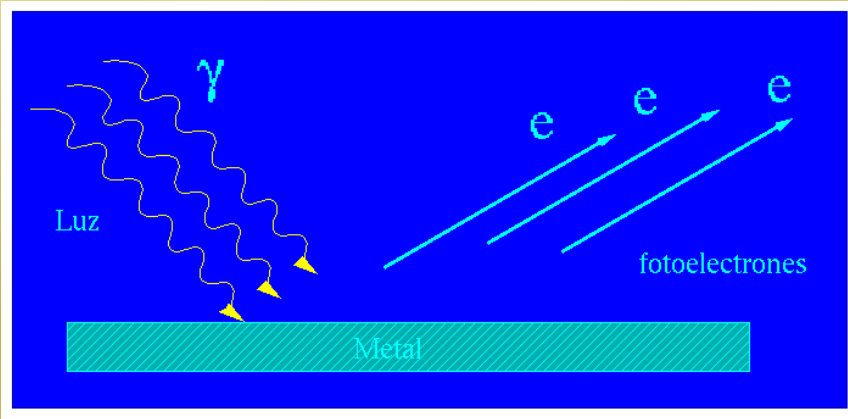


Pero...

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Emisión de electrones por superficies iluminadas

Efecto fotoeléctrico (Hertz)



La existencia del efecto fotoeléctrico no es sorprendente pero....

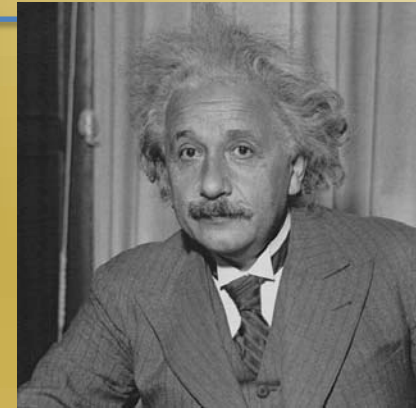
1. Emisión instantánea, aparece y desaparece con la radiación EM.
2. Número de electrones emitidos/t $\propto$ Intensidad radiación incidente
3. Su energía máxima es independiente de la int. de la radiación incidente
4. Frecuencia umbral ν_0 . Para $\nu < \nu_0$ no se emiten electrones
5. E_c máxima de los e^- emitidos = cte $(\nu - \nu_0)$
cte = $6.62 \cdot 10^{-34}$ J.s independiente del tipo de blanco

Imposible si la luz es onda!!

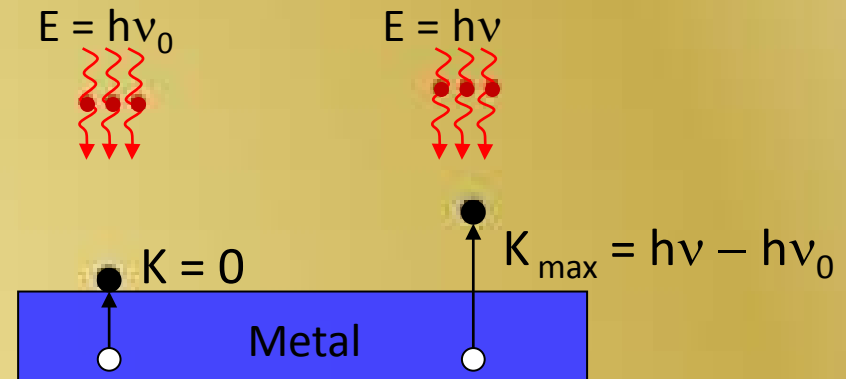
2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Emisión de electrones por superficies iluminadas

Einstein (1905). Hipótesis:
Teoría cuántica de la luz



- Planck, 1900. Cuerpo negro: luz = emitida como corpúsculos de energía $E = h \cdot \nu$ pero viaja como onda
- Einstein: la luz es emitida, viaja y es absorbida como cuantos (fotones)



- Interacción un fotón-un electrón

$$h\nu = \Phi + K_{\max}$$

$$\Phi = h\nu_0 \quad (\text{función de trabajo})$$

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

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Emisión de electrones por superficies iluminadas

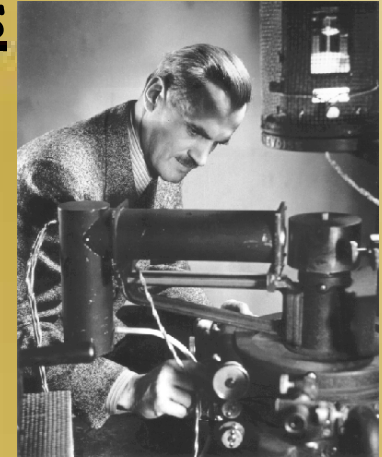
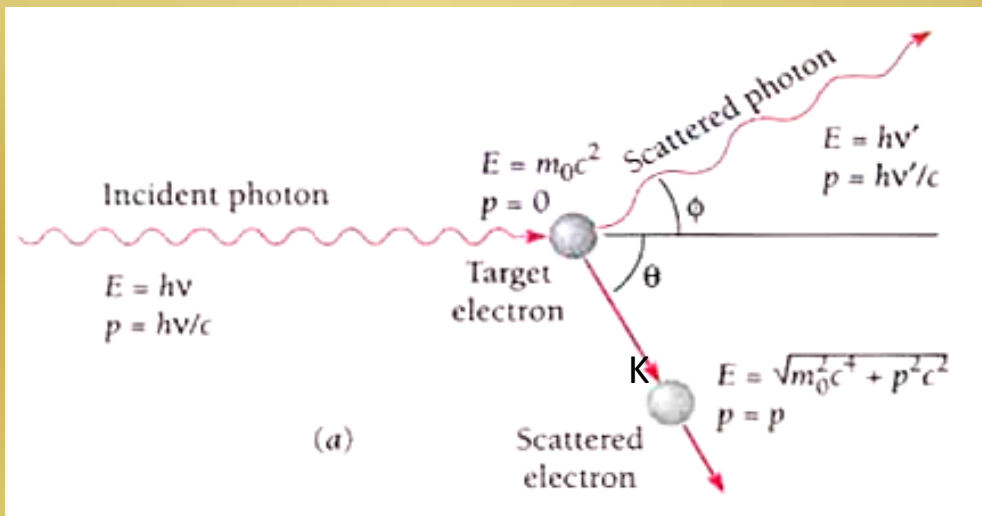
- Confirmación experimental: Millikan 1914.
- Einstein: Premio Nobel 1921
- Hipótesis del fotón: Un fotón tiene energía $h\nu$ (y masa en reposo $=0$) válida en todo el espectro e.m.
- Radiación de la cavidad = Gas de fotones de energía $h\nu$ (Bose-Einstein)

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Emisión de electrones por superficies iluminadas

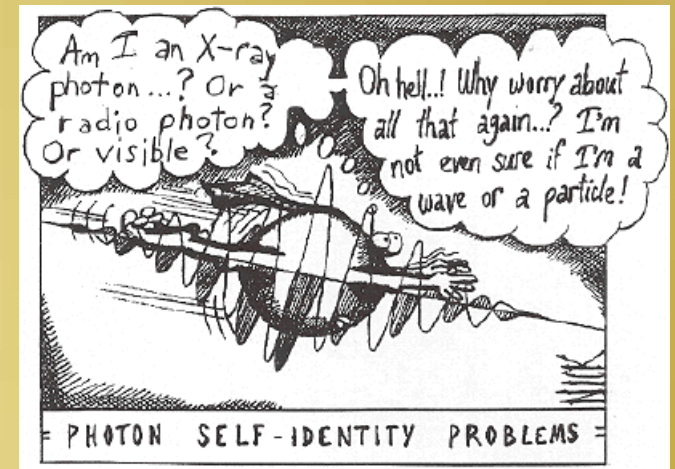
Efecto Compton (1923)

Scattering de fotones por electrones



Premio Nobel 1927

Dualidad onda-corpúsculo

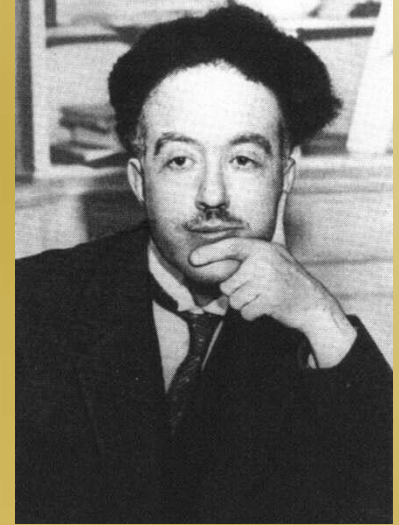


2.- Los primeros 25 años del siglo XX

Solo la luz tiene doble naturaleza ondulatoria y corpuscular?

La partícula es una onda?

L.de Broglie 1924: propiedades ondulatorias de las partículas



Postulado de L.de Broglie.: Sin evidencia experimental

$$\begin{array}{ll} \text{Luz} & \Longrightarrow p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad \rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{p} \\ \text{Partículas} & \Longrightarrow \quad \lambda = \frac{h}{mv} \end{array}$$


Todo cuerpo que se mueve tiene naturaleza ondulatoria con :

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

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

La partícula es una onda?

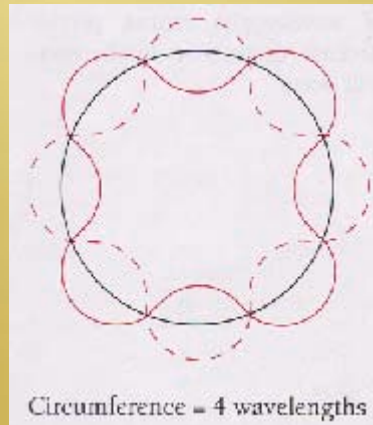
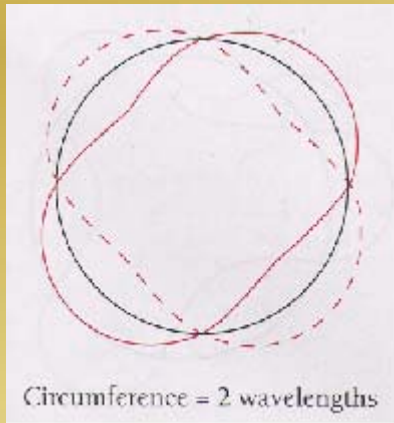
✓ **Carácter ondulatorio de una partícula**

$$\lambda \ll d \text{ clásica}$$

$$\lambda \sim d \text{ ondulatoria, cuántica}$$

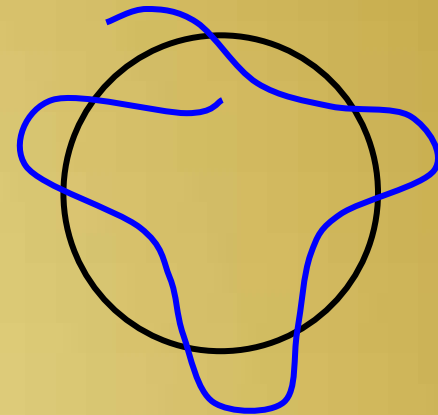
✓ **Confirmó el postulado de cuantización de la energía de Bohr**

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



Condición de estabilidad de una órbita

$$2\pi r_n = n\lambda \quad (n=1,2,3, \dots)$$



**Interferencia
destructiva**



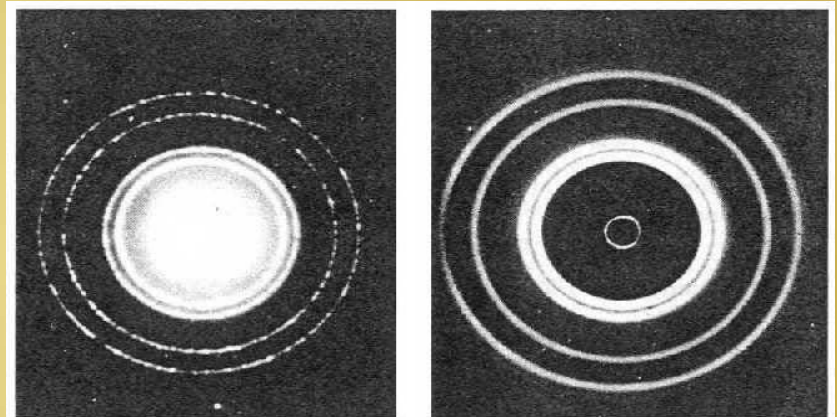
Niveles de energía de Bohr

2.- Los primeros 25 años del siglo XX

La partícula es una onda?

Confirmación experimental del postulado de L.de Broglie

- Experimento de Davisson y Germer (1927)
- Experimento de G.P. Thomson (1927)
- Premio Nobel en 1937 con Davisson
- 1929: Premio Nobel (de Broglie)

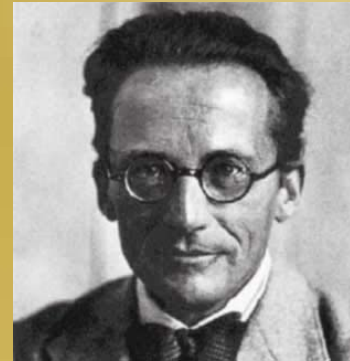


X-Ray pattern of Aluminum foil (left).
Electron Diffraction pattern of Aluminum foil (right)

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Finales de 1925

Era evidente la necesidad un procedimiento general para tratar el comportamiento de las partículas de cualquier sistema microscópico



Schrödinger (1887-1961)

- Hasta 1925 trabajos no muy importantes excepto en Teoría del color
- Diciembre de 1925 Termodinámica estadística "Sobre la teoría del gas de Einstein"
- 7 Dic.1925. Seminario sobre la tesis de L.de Broglie
 - Debye: "Para tratar correctamente las ondas, se necesita una ecuación de ondas"
- Vacaciones en Arosa. Al volver : "Yo tengo una ecuación de ondas"
- Seis meses de gran actividad que cambiaron la Física: reprodujo los resultados del átomo de Bohr: cuantización no "ad hoc"

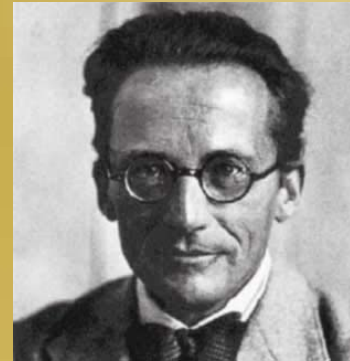
3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Finales de 1925

Era evidente la necesidad un procedimiento general para tratar el comportamiento de las partículas de cualquier sistema microscópico



Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica



- ✓ Leyes del movimiento ondulatorio a las que obedecen las partículas de cualquier sistema microscópico. Especifican:
 - La ecuación que controla el comportamiento de la función de onda
 - La conexión entre el comportamiento ondulatorio y el comportamiento de partícula
 - Sobre la base del postulado de de Broglie
 - Leyes de Newton como caso particular
 - No relativista

Premio Nobel 1933

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

- Se basa en un conjunto de **axiomas** .
- Estos axiomas pueden ser razonables e incluso algunos, intuitivos .
- Se justifican porque: la E.S. que de ellos se deduce, permite describir correctamente y predecir fenómenos físicos medibles.

Fuerza que actúa sobre la partícula



Ecuación de ondas
de Schrödinger



Función de onda ?

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

Argumentos que conducen a la ecuación de Schrödinger

1.- Consistente con los postulados de Einstein-de Broglie

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad v = \frac{E}{h}$$

2.- Consistente con la ecuación no relativista

$$E = p^2/2m + V$$

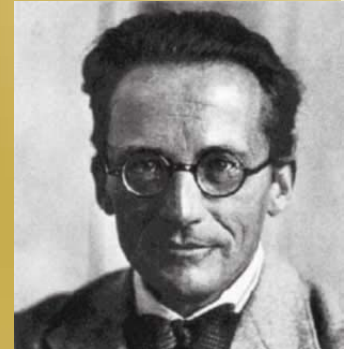
3.- Tiene que ser lineal en $\Psi(x,t)$

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

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

↑
Ecuación de Schrödinger, 1926



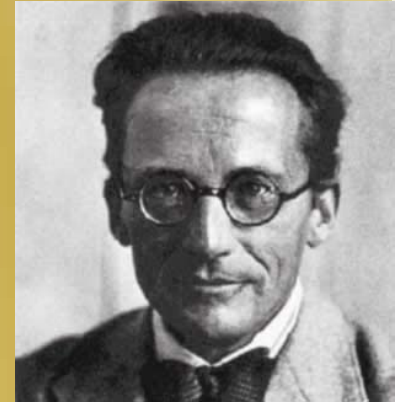
- Es una ecuación lineal
- Es una ecuación no relativista. Si las partículas son relativistas: ecuación de Klein-Gordon, ecuación de Dirac

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

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

↑
Ecuación de Schrödinger, 1926

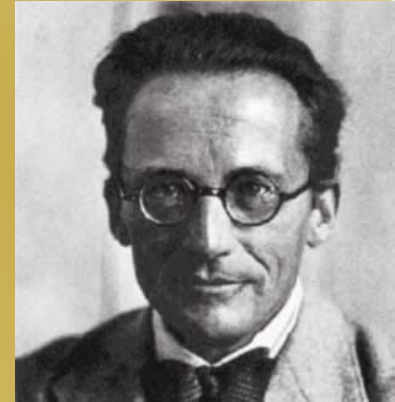


- La función de onda puede ser compleja (no en mec.clásica)
- No existencia física , solo es una herramienta computacional
- Pero sí tiene interés físico
- Ecuación de primer orden en el tiempo: una sola condición inicial

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

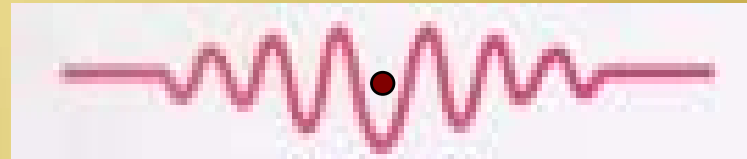
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t)$$



Interpretación de Born de la función de onda.

- **Postulado de Born (1926):** $P(x,t) dx$ es la probabilidad de que, al hacer una medida para localizar la partícula, encontremos esta entre x y $x+dx$ en el instante t

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$



Conexión entre las propiedades de la onda y de la partícula

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

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

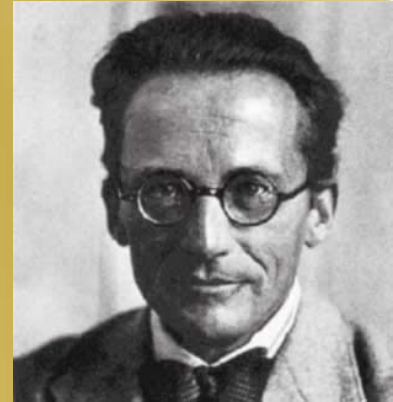
$\equiv V(x)$ Sistemas conservativos

Separación de variables $\Psi(x,t) = \varphi(x) \chi(t)$

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

$$\chi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo



3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

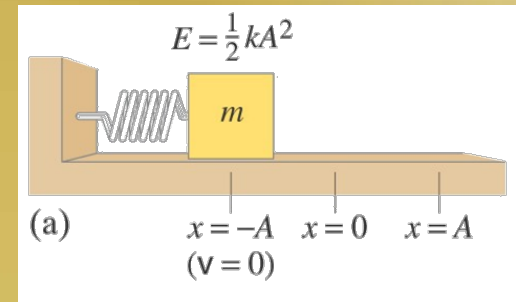
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Ejemplo: **Oscilador armónico** $V = \frac{1}{2} k x^2$

Función de onda est.fund. $\Psi(x,t) = A e^{-ax^2} e^{-ibt}$

Energía = $(n+1/2) h\nu$; $n=0,1,2,\dots$

- ✓ Energía cuantificada (distinta de la postulada por Planck)
- ✓ $n = 0$ permitido pero energía mínima $\neq 0$
- ✓ Niveles igualmente espaciados
- ✓ Número infinito de estados
- ✓ $n =$ cuantos de oscilación



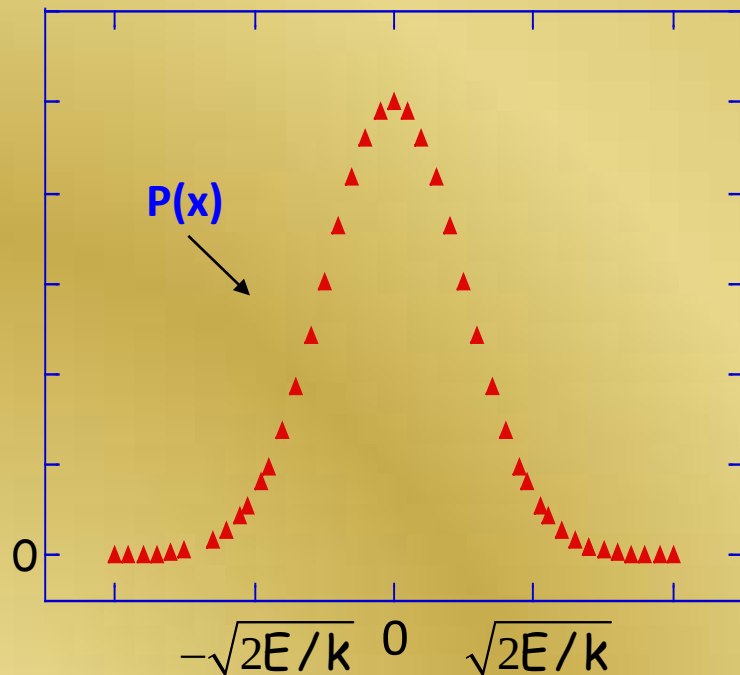
$$a = \frac{\sqrt{km}}{2\hbar} \quad b = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Ejemplo: Oscilador armónico

- Densidad de probabilidad independiente del tiempo

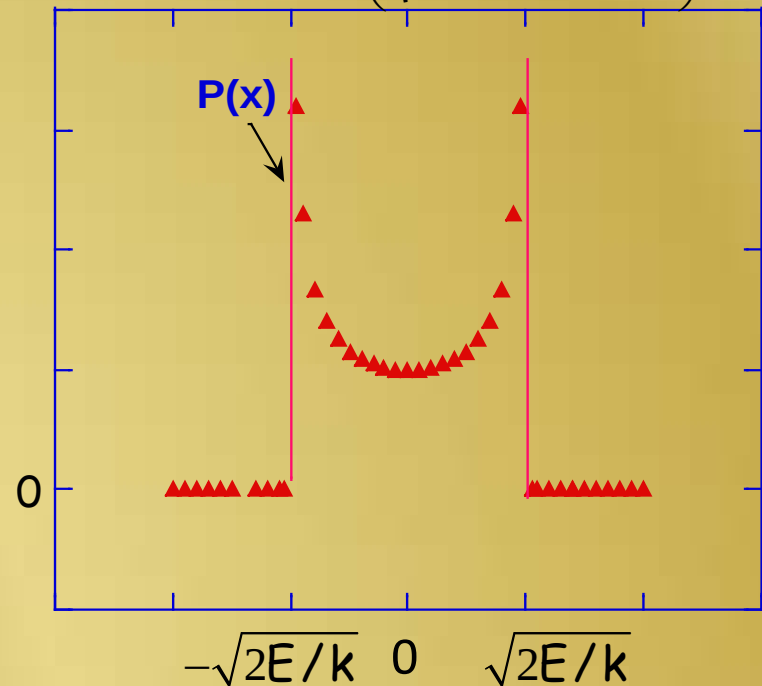
$$P(x, t) = |A|^2 e^{-(\sqrt{km}/h)x^2}$$



Cuántico

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = 1$$

$$P(x, t) = |B|^2 \left(\sqrt{\frac{2}{m} \left(E - \frac{Cx^2}{2} \right)} \right)^{-1}$$



Clásico

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

- **Función de onda $\Psi(x,t)$** : contiene toda la información del sistema

Permite calcular probabilidades y todas las magnitudes medibles de un sistema

Valor esperado o valor medio de la posición

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x P(x,t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t) dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx}$$

Valor esperado del momento

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right) dx$$

Valor esperado de la energía

$$\langle E \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \right) dx$$

- Valor esperado de una función de x , p y t

$$\langle f(x,p,t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) f_{op} \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t \right) \Psi(x,t) dx$$

3.-El descubrimiento de la Mecánica Ondulatoria

Predicciones de la Mecánica Cuántica son de tipo **estadístico** debido al **principio de incertidumbre**

Born:

- ✓ La dependencia espacial de Ψ en $t=0$ es suficiente para conocer la dependencia espacial de Ψ en un instante posterior: ecuación de Schrödinger de 1^{er} orden en t (**determinista**)
- ✓ No conocemos completamente la dependencia espacial en $t=0$, solo la probabilidad

"El movimiento de las partículas está de acuerdo con las leyes de la probabilidad pero la probabilidad se propaga de acuerdo con las leyes de la causalidad"

Gracias por su atención