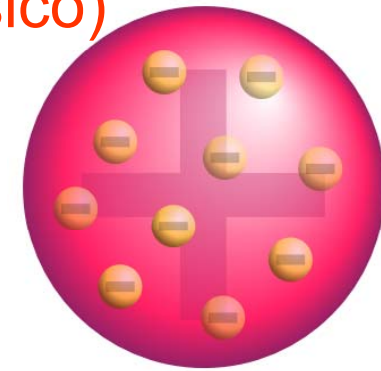


2. Propiedades ondulatorias de las partículas LIBRES

1. El modelo atómico (clásico) de Rutherford (1906-11)
2. El modelo atómico de Bohr (1913)
3. La hipótesis de L. de Broglie (1924)
4. Difracción de electrones por un cristal.
5. El experimento de las dos rendijas de Young.
6. El “principio” de superposición
7. “Paquete” o “grupo” de ondas.
8. Ecuación diferencial de las ondas libres
9. El momento lineal de un paquete.
10. Valores esperados
11. Interpretación de Copenhague/variables ocultas

1. Modelo atómico de Rutherford (1911, clásico)

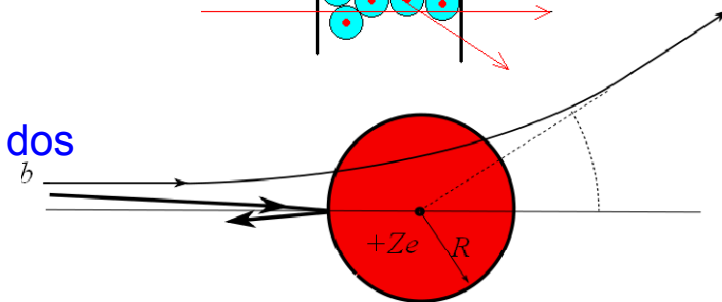
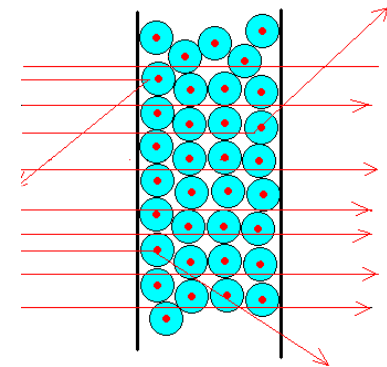
Thomson descubrió el electrón y propuso (1904) que el átomo es una esfera de radio $R \cong 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$, de carga positiva $+Ze$ y Z electrones de carga $-e$ moviéndose por su interior (modelo del “pastel de pasas”).



Rutherford trató de determinar el radio R . Para ello propuso (que sólo supervisó) un experimento lanzando partículas α ($q = +2e$, $m = 4m_p$), que provenían de una fuente radioactiva.

Los electrones del átomo producen un efecto despreciable (pequeña masa), por ello es de esperar que:

- 1) Si una partícula α pasa por fuera de la esfera se desviará debido a la repulsión coulombiana.
- 2) Si entra en la esfera se desviará de otra forma.
- 3) Si va dirigida muy cerca del centro pueden ocurrir dos casos:



- A) La partícula tiene energía suficiente: traspasará la esfera y saldrá por el otro lado
- B) La partícula no tiene la energía necesaria: volverá hacia atrás

Calculemos la energía necesaria para el caso B).

El potencial fuera de la esfera es: $V(r > R) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r}$

Y dentro es: $V(r < R) = \int_r^\infty E dr = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{R} + \int_r^R \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{r}{R^3} dr = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{2R} - \frac{r^2}{R^3} \right)$

(nota: el campo $E(r)$ en el interior es el que crea la carga que está a distancia menor que r del centro)

Por tanto el potencial en el centro ($r = 0$) es: $V(r = 0) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{2R}$

Es decir, **inversamente proporcional a R** para una carga total Ze dada, de modo que cuanto más pequeña sea la esfera más velocidad inicial de lanzamiento se necesita para que la partícula α alcance el centro

La energía cinética inicial de la partícula α necesaria para alcanzar el centro es pues:

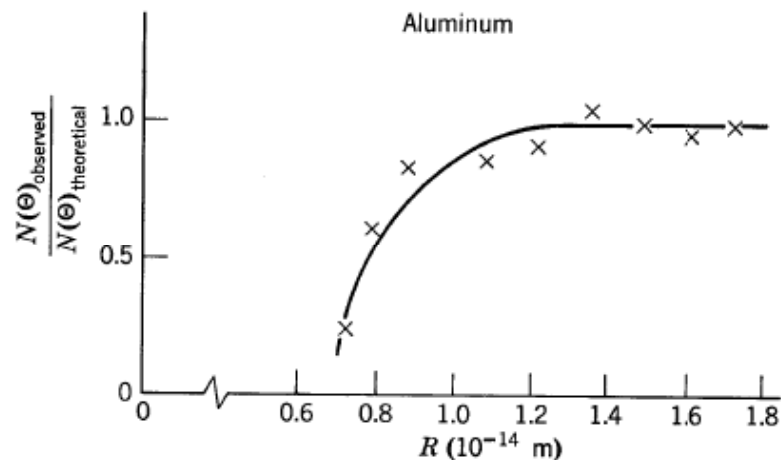
$$E = q_\alpha V(r = 0) = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{2R}$$

Como generadores de partículas α se usaron fuentes de Rn ($E \cong 6.5$ MeV), Ra ($E \cong 8$ MeV), U ($E \cong 4.2$ MeV) y como blancos, láminas de Au, Ag, Cu, Al.

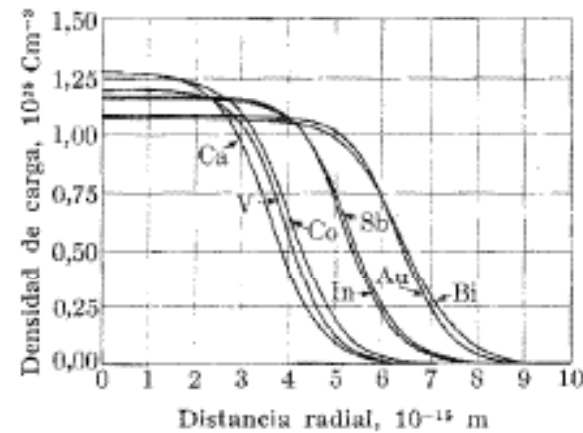
(Geiger-Mardsen, 1913)

Principales resultados del experimento:

- * La gran mayoría de las partículas seguía la trayectoria predicha por la fuerza coulombiana (no entran en el núcleo, caso 1)
- * La dispersión coulombiana se cumple excepto para partículas que pasan a menos de 10^{-14} m del centro (el caso 2)
- * Hay 1/20000 partículas rebotadas hacia atrás incluso con energías incidentes de 8 MeV: $R < 1.4 \times 10^{-14}$ m (caso 3 B, calcular para un blanco de Cu, $Z = 29$)



Geiger-Marsden, 1913



Determinación reciente (Hahn et al 1956, scattering de neutrones)

- * El átomo está compuesto por un (lo que hoy llamamos) “núcleo” positivo pequeño (de $R \cong 10^{-14} \text{ m}$) y los electrones ocupan el resto del espacio, hasta $r \cong 10^{-10} \text{ m}$

Modelo atómico de Rutherford (1911, clásico)

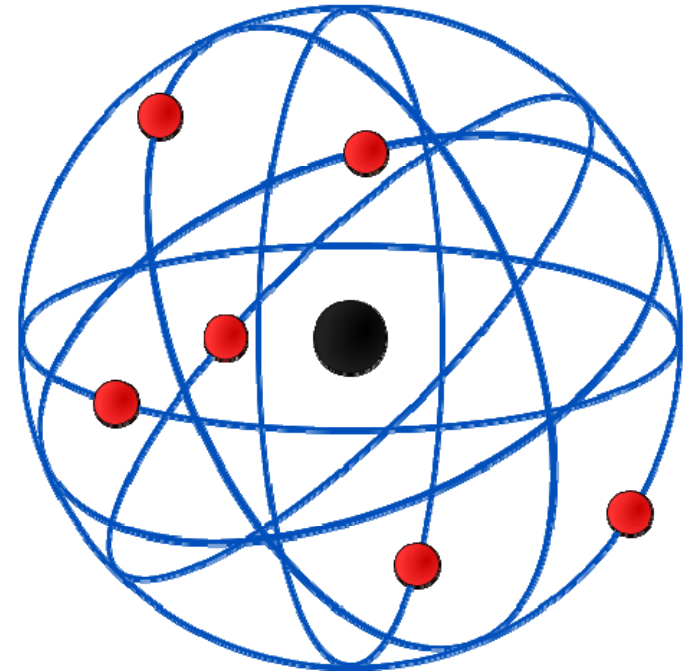
Rutherford supuso que los electrones orbitaban el núcleo a modo “planetario”

Pero...

Un electrón en una órbita es un dipolo oscilante que emite ondas EM de frecuencia inversa del periodo orbital.

Los electrones emitirían continuamente radiación y caerían en el núcleo en un tiempo del orden de 10^{-12} s !!!

⇒ El átomo no sería estable y no podría existir



Comentario:

Dentro de unas semanas veremos que según la Mecánica Cuántica los electrones no orbitan como una partícula clásica (por lo tanto no emiten ondas EM) sino que están distribuidos en una esfera de radio de unos 10^{-10} m por exigencia de los “principios” cuánticos de incertidumbre y de exclusión de Pauli.

2. Modelo atómico de Bohr (1913)

Fue propuesto para explicar el espectro de emisión del hidrógeno.

Se basa en suposiciones completamente artificiales que contradicen las leyes físicas y **sin una justificación convincente**.

De los más de 100 átomos de la tabla periódica sólo explica UNO, el hidrógeno.

A. Sommerfeld extendió la concepción de Bohr incluyendo la posibilidad de órbitas elípticas

Postulados de Bohr:

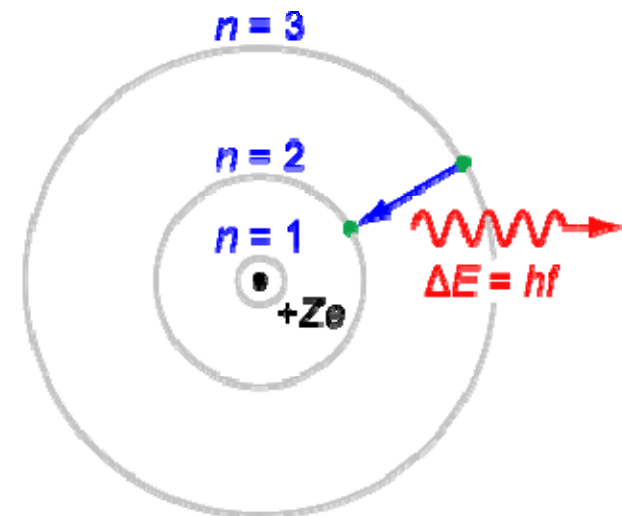
1 *Los electrones describen órbitas circulares en torno al núcleo del átomo sin irradiar energía.*

2 *Sólo son posibles órbitas cuyo radio cumpla que el momento angular del electrón sea un múltiplo entero de $h/2\pi$, es decir:*

$$2\pi r p = nh$$

3 *El electrón sólo emite o absorbe energía cuando salta de una órbita permitida a otra.*

*En dicho salto emite o absorbe **un solo fotón** cuya frecuencia multiplicada por h es la diferencia de energía entre ambos niveles.*



$$E_f - E_i = h\nu$$

Espectro del hidrógeno y predicción de Bohr

De acuerdo con el postulado 2, se pueden obtener las energías de las órbitas circulares posibles:

Por la 2ª ley de Newton: $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \Rightarrow r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 m} \frac{e^2}{v^2}$

Ahora usando el postulado 2: $2\pi r m v = n h$

$$2\pi m r v = 2\pi \sqrt{\frac{m e^2 r}{4\pi\epsilon_0}} = n h \Rightarrow$$

$$r_n = n^2 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m e^2} = n^2 a_0$$

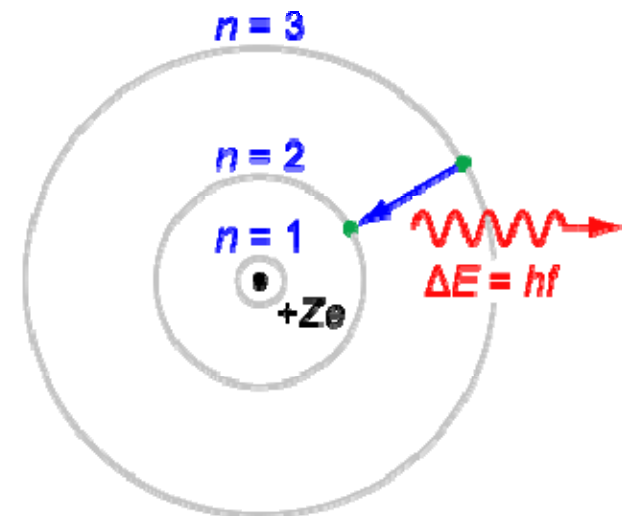
Donde la constante: $a_0 \equiv 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m e^2} = 0.5292 \times 10^{-10} \text{ m}$

Se llama **radio de Bohr**

Y la energía: $E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} + \frac{1}{2} m v^2 = -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$

Sustituyendo los radios de las órbitas posibles:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a_0} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} m \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2} = -13.60580(5) eV \frac{1}{n^2}$$



$$E_f - E_i = h \nu$$

Predicción de Bohr y experimento

Según el 3er postulado, las frecuencias de la radiación emitida pueden ser

$$h\nu = E_{n_i} - E_{n_f} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a_0} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) =$$
$$13.60580(5)eV \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

Y opuestamente las absorbidas
(espectro de absorción)

El resultado coincide perfectamente con el observado.

Sin embargo se debe a una feliz casualidad que tardó años en mostrarse.

La coincidencia tan perfecta teoría-experimento hizo que los científicos le prestaran mucha atención.

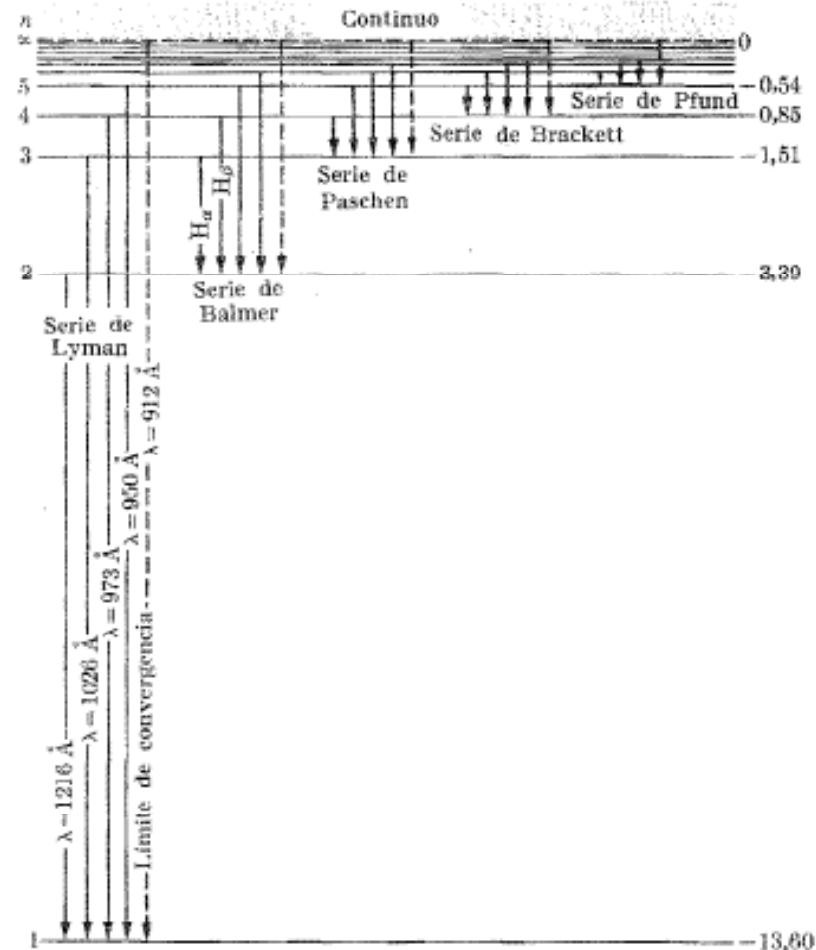


Fig. 3-4. Transiciones radiativas en el hidrógeno.

Crítica (despiadada) del modelo de Bohr

El modelo se hizo tan famoso que incluso hoy se enseña en cursos elementales de Física o de Química

Pero es **erróneo**, y considerando el conocimiento la Mecánica Cuántica desde los años 30 hasta la actualidad, a posteriori podemos decir:

* El **postulado 1** fue enunciado sin ninguna justificación, atenta contra las leyes fundamentales del electromagnetismo y además es simplemente **FALSO** . Si una carga siguiera una órbita circular (y hay experimentos muy recientes de eso) emitiría y emite radiación tanto según la MCL como según la MQ.

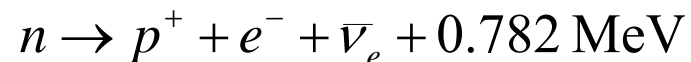
* Lo que pasa es que en los estados estacionarios (de energía definida) el electrón no orbita, sino que se asemeja más a una distribución volúmetrica y estacionaria de carga.

* El **postulado 2** es un teorema que la MQ demuestra para un movimiento periódico casi-clásico (es decir con $n \gg 1$), pero no necesariamente para valores pequeños de n .

* Es **una feliz coincidencia** que se cumpla $\forall n$ para un potencial $V = -K/r$.Pero por ejemplo para un potencial $V = -k/r^3$ sólo se cumple con valores de n muy grandes.

Hay que añadir que **los electrones SÍ pueden caer en el núcleo** y quedar atrapados, y de hecho ocurre con algunos átomos que tienen escasez de neutrones, como el ${}^7\text{Be}$, ${}^{11}\text{C}$, ${}^{18}\text{F}$, etc

La captura electrónica en el hidrógeno no ocurre porque eso incrementa la energía, debido a la interacción nuclear “débil” (que ni Bohr ni Rutherford consideraron). Lo que ocurre es a la inversa: el neutrón libre emite un electrón según:



3. La hipótesis ondulatoria de L. de Broglie (tesis 1924)

Pour généraliser ce résultat dans le cas du mouvement non uniforme, on est amené à admettre une proportionnalité entre le vecteur Impulsion d'Univers d'un point matériel et un vecteur caractéristique de la propagation de l'onde associée dont la composante de temps est la fréquence. Le principe de Fermat appliqué à l'onde devient alors identique au principe de moindre action appliqué au mobile. Les rayons de l'onde sont identiques aux trajectoires possibles du mobile (ch. II.)

explicando la condición de Bohr-Sommerfeld...
nous avons appris à calculer la valeur. La propagation est donc analogue à celle d'une onde liquide dans un canal

RECHERCHES SUR LA THÉORIE DES QUANTA

65

(para trayectorias elípticas)

fermé sur lui-même et de profondeur variable. Il est physiquement évident que, pour avoir un régime stable, la longueur du canal doit être en résonance avec l'onde; autrement dit, les portions d'onde qui se suivent à une distance égale à un multiple entier de la longueur l du canal et qui se trouvent par suite au même point de celui-ci, doivent être en phase. La condition de résonance est $l = n\lambda$ si la lon-

3. La hipótesis ondulatoria de L. de Broglie

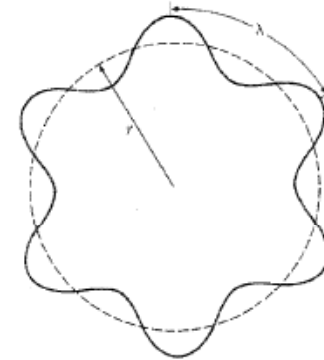
De Broglie explicó los “postulados” de Bohr suponiendo que los electrones (y por extensión aceptemos que todas las “partículas”) también se comportan como ondas de modo que:

Una partícula de energía E y momento p se comporta como una onda

de frecuencia: $\nu = \frac{E}{h}$; o bien $\omega = \frac{E}{\hbar}$

Longitud de onda: $\lambda = \frac{h}{p}$; o bien $p = \hbar k$ $k = \text{vector de onda } |k| = \frac{2\pi}{\lambda} = \text{n}^\circ \text{ de ondas}$

De Broglie consideró la órbita circular de radio r de una partícula alrededor de un centro atractor como “un canal líquido”. Análogamente a las ondas estacionarias en una cuerda tensa, el electrón, (con energía constante) “sería una onda (serie de olas) monocromática que sólo se podría mantener si la longitud de la órbita es un número entero de veces λ ” (de Broglie, Tesis 1924).



$$2\pi r = n\lambda \Rightarrow p2\pi r = nh$$

4. Confirmación experimental: difracción de electrones por un cristal (Davidsson-Germer 1927)

Las propiedades ondulatorias de una partícula se podrían poner de manifiesto en un experimento de dos rendijas de Young, pero:

Para un electrón acelerado por un voltaje de 10000 V: $E = 10^4 \text{ eV}$

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = \sqrt{\frac{2 \times 10^4 \text{ eV}}{9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}}} = 6 \times 10^7 \text{ m/s} \quad \lambda = \frac{h}{mv} = 1.2 \times 10^{-11} \text{ m}$$

Pero...

no podemos construir una pared con doble rendija porque la separación entre las aberturas debe ser menor que el tamaño de un átomo.

Deberíamos usar electrones mucho más lentos pero era imposible controlarlos en 1927, e incluso Feynman en 1965 pensaba que era imposible realizar un experimento de dos rendijas con electrones.

Solución: la misma que con RX: DIFRACCIÓN POR UN CRISTAL.

Un cristal es una distribución periódica de átomos, como una red de difracción 3D

!!! “Difracción” (en realidad ES INTERFERENCIA) de las ondas desviadas por los átomos de un cristal !!!

Difracción de “verdaderas” ondas (RX) por un cristal

(M von Laue 1912, WH y WL Bragg, 1913)

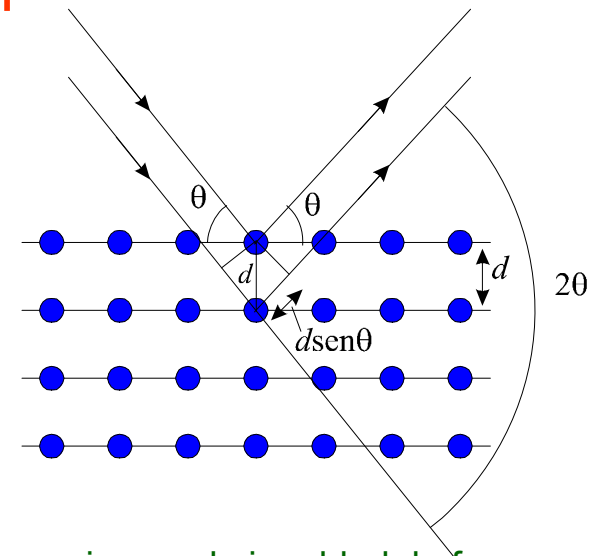
Un cristal se puede ver como una superposición de planos atómicos paralelos. Los rayos X son desviados por cada átomo al ser alcanzados por la onda incidente

Las condiciones de interferencia constructiva de las ondas dispersadas por todos los átomos exige dos cosas:

1) $\theta_i = \theta_r$ = Ley de la reflexión óptica

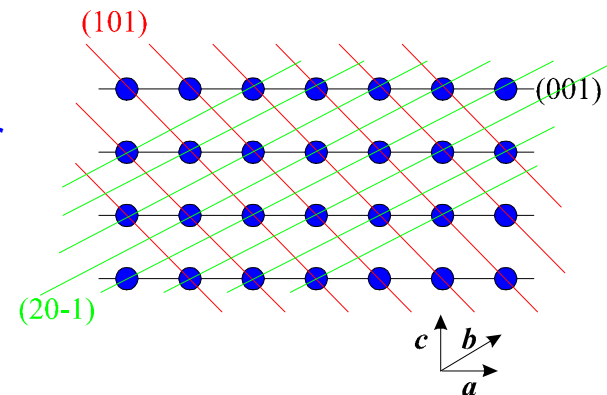
2) $2d \sin \theta = n\lambda$ Ley de Bragg

Cada familia de planos en el cristal puede producir “reflexiones de Bragg” pero en cada caso hay que orientar el cristal adecuadamente



1) Necesaria para la igualdad de fase de las ondas producidas por los átomos de un plano

2) Superposición constructiva de las ondas producidas por átomos de planos diferentes

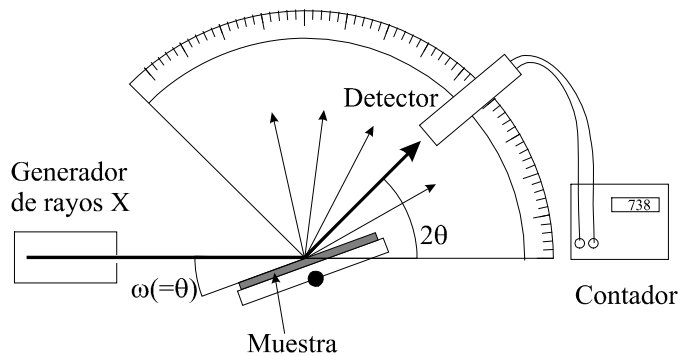
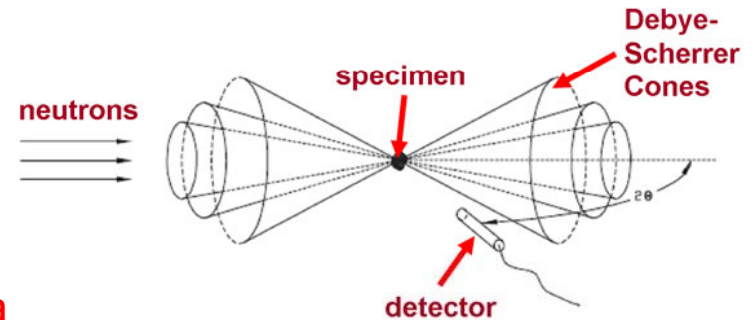


Difracción de ondas (RX) por polvo (Debye-Scherrer, 1916)

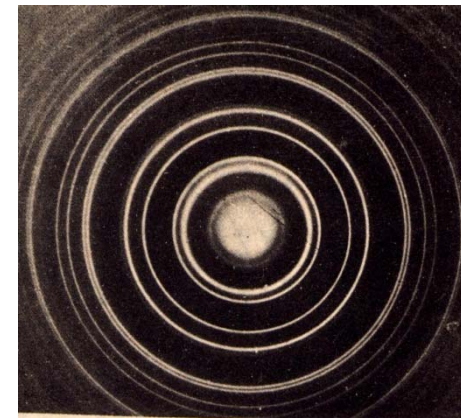
El polvo está formado por muchos (del orden de 10^8) cristalitas orientados al azar.

Por tanto siempre hay algunos pocos orientados adecuadamente para producir cualquier reflexión de Bragg.

Entonces se produce una reflexión de Bragg para cualquier dirección que forme un ángulo 2θ con el rayo incidente, siempre que el valor de θ corresponda a alguna distancia interplanar, de acuerdo con la fórmula de Bragg



Experimento con detector puntual



Placa fotográfica

!!! Difracción de partículas !!!

Electrones: Davidson-Germer (1927), GP Thomson (1927)

Neutrones: Wollan-Shull (1946)

¿Por qué no partículas α ? (Rutherford)

Respuesta:

Las partículas α usadas por Rutherford son trenes de onda de longitud (“de coherencia”) mucho más corta que las distancias entre átomos. Así pues, no interfieren y EN ESE EXPERIMENTO se comportan como partículas clásicas.

Si los neutrones o electrones se comportaran clásicamente se observaría la dispersión de partículas como si cada átomo estuviera aislado, de forma parecida a las partículas α de Rutherford (es decir sin cumplir la ley de Bragg), pero no lo hacen así, sino como los rayos X

Hoy día la difracción de neutrones o de electrones es una técnica rutinaria para el estudio de los sólidos. Se hacen más de 1000 experimentos diarios en todo el mundo y en los últimos 70 años no se ha publicado ni uno sólo que contradiga la hipótesis de L. de Broglie

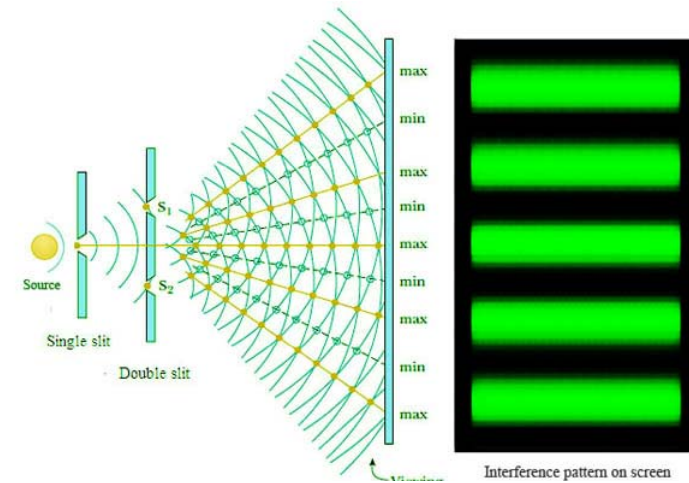
5. El experimento de las dos rendijas de Young con “ondas clásicas”

Con la luz visible:

T. Young (1811) ? (no se sabe si realmente lo hizo)

G. I. Taylor (1909)

Cubeta de ondas en agua: prácticas de Física General.



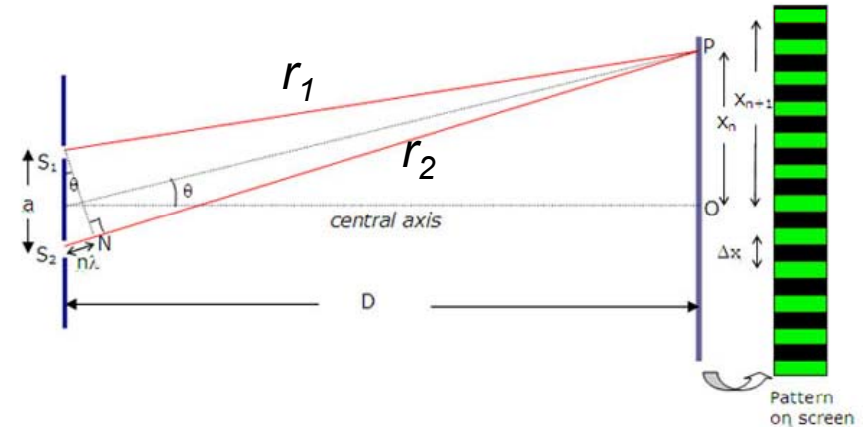
Con ondas “clásicas” la interpretación es simple y también clásica:

cada rendija se comporta como un emisor puntual (ppo. de Huyghens-Kirchhoff).

Interferencia:

Constructiva: cuando la diferencia de camino recorrido por cada onda es

Destrucción cuando la diferencia de camino recorrido por cada onda es

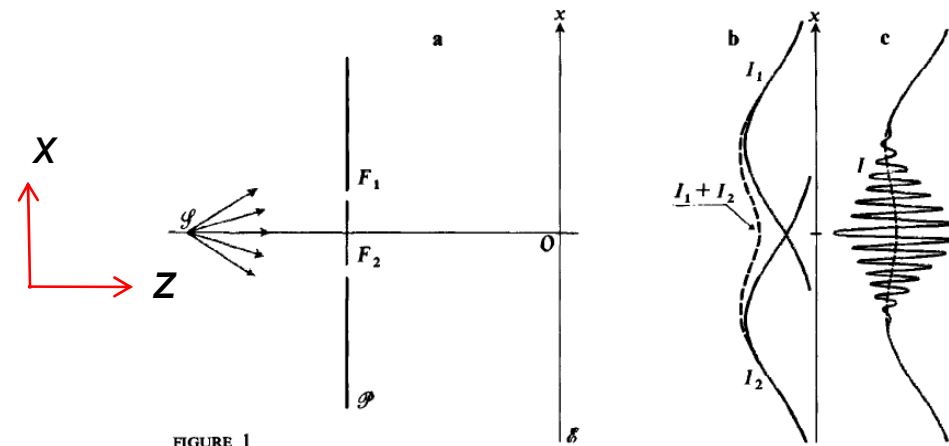


$$r_2 - r_1 = n\lambda$$

$$r_2 - r_1 = (2n + 1) \frac{\lambda}{2}$$

El experimento (?) de las dos rendijas de Young con “partículas”

PENSADO por R. Feynman (1965),
(con intención didáctica)
realizado parcialmente:



C. Jönsson (1961), G. Pozzi et al (1974) , A. Tonomura et al. (1989)!
exactamente como Feynman lo pensó: G. Pozzi (2008, 2012) !!!

La clave del experimento es que enviamos los electrones **DE UNO EN UNO**, con **velocidad fijada** en direcciones al azar y registramos los impactos en una placa fotográfica.

Al cabo de mucho tiempo de experimento:

A) Con una rendija (la 2) cerrada obtenemos una figura de difracción $I_1(x)$.
Análogamente con la 1 cerrada, obtenemos $I_2(x)$.

B) Si abrimos las dos obtenemos difracción **E INTERFERENCIA**

¿de qué con qué?

El experimento de las dos rendijas de Young con “partículas”

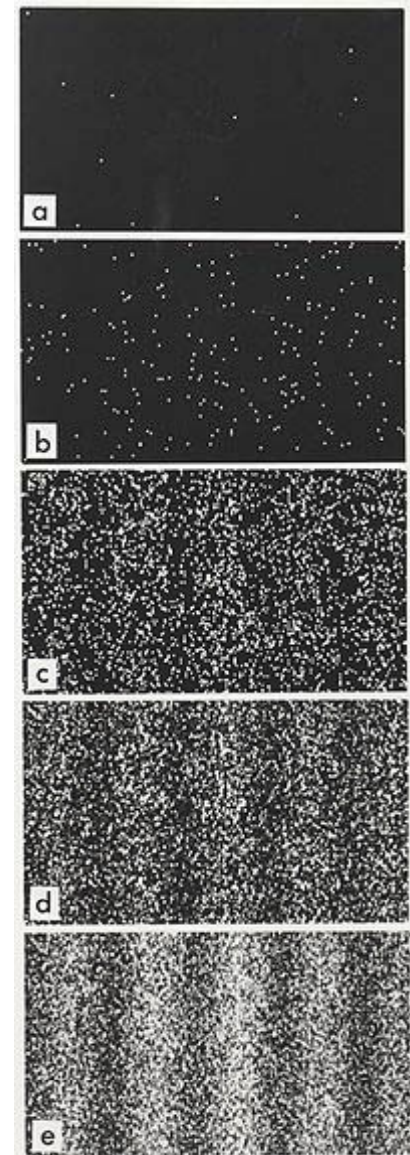
La difracción por una sola rendija se podría “casi” (¡¡ pero mal y no del todo!!) explicar clásicamente por las fuerzas que ejerce la rendija sobre un electrón: si la pared produce un campo eléctrico desviará los electrones que pasen cerca del borde. Cuanto más estrecha sea la rendija mayor proporción de electrones serán desviados.

La explicación es errónea porque no explica los máximos secundarios de difracción y porque la difracción ocurre también con neutrones que tendrían que pasar a menos de 10^{-14} m del borde de la rendija (el tamaño de un núcleo atómico) para ser desviados

La interferencia es lo que explica de Broglie y contradice la Mecánica Clásica: **UN SOLO ELECTRON se comporta como una onda.**

El experimento (figura) se ha realizado recientemente con electrones y con neutrones y muestra:

- * Si se lanza un solo electrón da en un punto impredecible de la pantalla
- * Después de lanzar muchos se ve la preferencia por los lugares de interferencia constructiva
- * También se ha realizado con fotones, de uno en uno



Interpretación física de la función de onda (M. Born, 1926)

En una onda **electromagnética** la variable descrita es el vector campo eléctrico (o el magnético): es transversal

La intensidad es el módulo del vector de Poynting promedio, proporcional a E^2 o también a B^2 .

Ejemplo: $\mathbf{E} = E_0 \mathbf{u}_x e^{i(kz - \omega t)}$ $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{u}_y e^{i(kz - \omega t)}$

$$\langle \mathbf{S} \rangle \equiv \frac{1}{2} \mathbf{E}^* \times \mathbf{H} = \frac{1}{2} \frac{E_0 B_0}{\mu_0} \mathbf{u}_z = \frac{1}{2} \frac{E_0^2}{\mu_0 c} \mathbf{u}_z = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c E_0^2 \mathbf{u}_z \quad I = |\mathbf{S}| = \frac{1}{2} \varepsilon_0 E_0^2 c$$

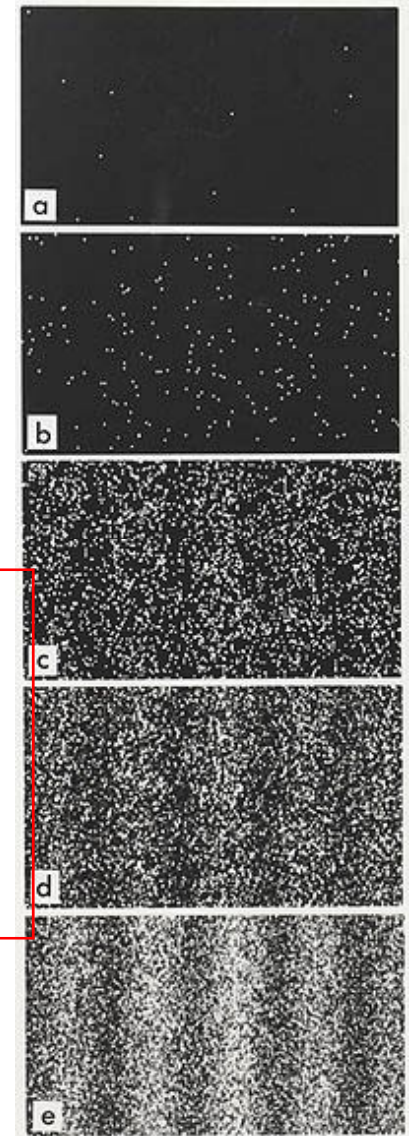
En una onda de “de Broglie” la variable descrita: $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es un número complejo (no vector), cuyo módulo al cuadrado

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

da la **probabilidad** por unidad de volumen de encontrar la partícula en un sitio \mathbf{r} dado en el instante t

La probabilidad de encontrarla en un dV centrado en \mathbf{r} es $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$

Es una onda escalar (como la temperatura o la presión en el sonido)



6. El principio de superposición

Dice que la resultante de dos ondas que se superponen es la suma de cada una por separado.

El experimento de las dos rendijas es una muestra de ello. Se tienen las DOS ondas esféricas (en realidad cilíndricas porque es en 2D) que proceden de cada rendija: El resultado en cualquier punto (no sólo en la pantalla) es la suma.

La figura de máximos y mínimos de intensidad sale exactamente al sumar las dos perturbaciones instantáneas (con amplitud y fase)

Matemáticamente en una onda clásica la perturbación está descrita por la ecuación “de ondas” de d’Alembert

$$\nabla^2 \varphi(x, y, z, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi(x, y, z, t)}{\partial t^2}$$

A) Por los experimentos señalados, y por muchos otros, debemos aceptar que las ondas de de Broglie cumplen el principio de superposición,

B) Pero como veremos pronto las ondas de de Broglie no cumplen la ecuación de d’Alembert sino otra, también lineal, y diferente debido a la masa en reposo no nula de las partículas “auténticas”, que no tiene el fotón.

7 Paquete de ondas I. ¿Cuál es la velocidad de la onda que corresponde a una partícula?

Calculemos:
$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar E}{p\hbar} = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{mv} = \frac{1}{2}v \quad !!??$$

Pero esta es la **velocidad de fase**: velocidad a la que se mueven los frentes de onda y la que cuenta para interferencias

La **velocidad de grupo**:
$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Para hacer la derivada podemos escribir ω en función de k :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Entonces:
$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar}{2m} \frac{dk^2}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v_{partícula}$$

¿Por qué la velocidad de fase y de grupo son distintas?

Debido a la masa en reposo de la partícula.
$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$$

Si fuera nula, como en el fotón, la onda se movería a una velocidad constante característica del medio (para el fotón c)

Paquete o grupo de ondas II

(resultados bien conocidos de la Óptica Física)

Debido al principio de superposición la función de onda que representa el estado una partícula puede ser una superposición de ondas monocromáticas :

“PAQUETE O GRUPO DE ONDAS”

Por simplificar la notación, veamos el caso en 1D:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk$$

Se reconoce que $g(k)$ es la transformada de Fourier espacial de $\Psi(x, t = 0)$ y esa expresión puede representar (casi) cualquier función de x .

Y consideremos primero el caso particular simple en que : $g(k) = \begin{cases} 1, & \text{si } k_0 - \Delta k / 2 < k < k_0 + \Delta k / 2 \\ 0, & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$

k_0 es el valor medio de k y Δk un pequeño intervalo de valores de k considerados, cercanos a k_0 .

El término $e^{i\omega(k)t}$ fuerza a que cada componente individual (con un k dado) se propague como una onda de frecuencia $\omega(k)$.

La resultante $\Psi(x, t)$ sin embargo sólo cumple la ec. de d'Alembert si $\omega = ck$ para alguna velocidad constante c .

Paquete o grupo de ondas III

(resultados bien conocidos de la Óptica Física)

Determinemos explícitamente $\Psi(x,t)$ para este ejemplo

Definimos la cantidad: $v_g \equiv \frac{d\omega}{dk}$ con dimensiones físicas de velocidad

Como Δk es pequeño podemos poner: $\omega(k) = \omega_0 + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0) + \dots \cong \omega_0 + (k - k_0)v_g$

Nos queda pues:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2} e^{i[kx - \omega(k)t]} dk = e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2} e^{i(k - k_0)[x - v_g t]} dk = e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} e^{iu[x - v_g t]} du = \\ &= \frac{e^{i[k_0 x - \omega_0 t]}}{i(x - v_g t)} \left(e^{i\frac{\Delta k}{2}[x - v_g t]} - e^{-i\frac{\Delta k}{2}[x - v_g t]} \right) = \Delta k e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} \frac{\sin \frac{\Delta k}{2}(x - v_g t)}{\frac{\Delta k}{2}(x - v_g t)}\end{aligned}$$

Dibujemos la función en $t = 0$
(página siguiente)

Paquete o grupo de ondas IV

(resultados bien conocidos de la Óptica Física)

$$\Psi(x, t) = \Delta k e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} \frac{\sin \frac{\Delta k}{2} (x - v_g t)}{\frac{\Delta k}{2} (x - v_g t)}$$

Dibujemos la función en $t = 0$ para $k_0 = 10 \text{ m}^{-1}$, $\Delta k = 1 \text{ m}^{-1}$

* Como se ve, el paquete resultante **sólo tiene amplitud apreciable** (“está **localizado**”) cerca de $x = 0$ en un intervalo de valores:

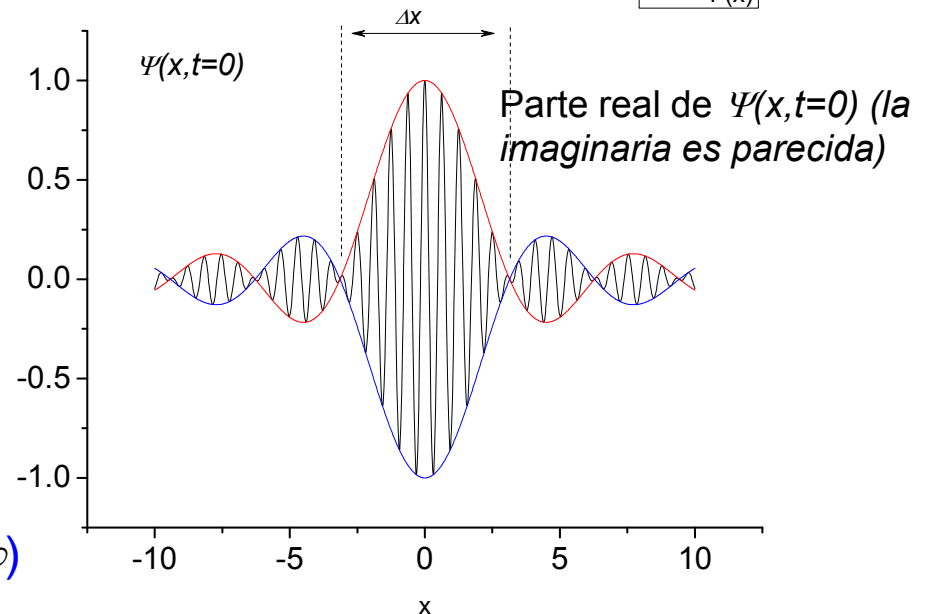
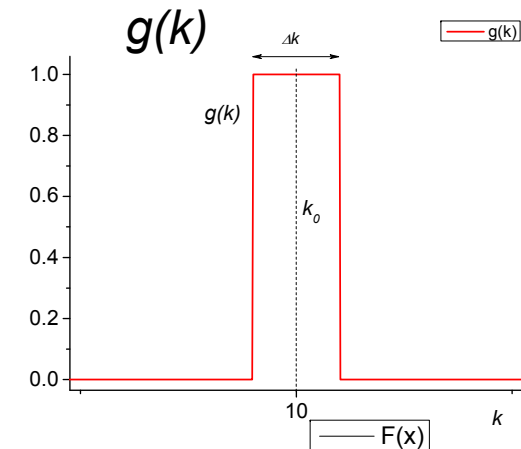
$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k}$$

* Dentro de la teoría ondulatoria sería lo más parecido a una partícula clásica

* $\Delta x \Delta k = 2\pi = \text{cte}$:

cuanto mayor es el intervalo de de k 's considerado, menor es Δx . ($\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta k \rightarrow \infty$)

* Un paquete con un solo k (monocromático) tiene amplitud constante ($\Delta x \rightarrow \infty$): **completamente deslocalizado**



Propagación del paquete

(resultados bien conocidos de la Óptica Física)

Considerando ahora la función resultante en cualquier instante vemos que:

$$\Psi(x, t) = \Delta k e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} \frac{\sin \frac{\Delta k}{2} (x - v_g t)}{\frac{\Delta k}{2} (x - v_g t)}$$

F(x)

* El **máximo de amplitud** (la envolvente y con ella la energía) se mueve hacia la derecha con una velocidad

$$v_g \equiv \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0}$$

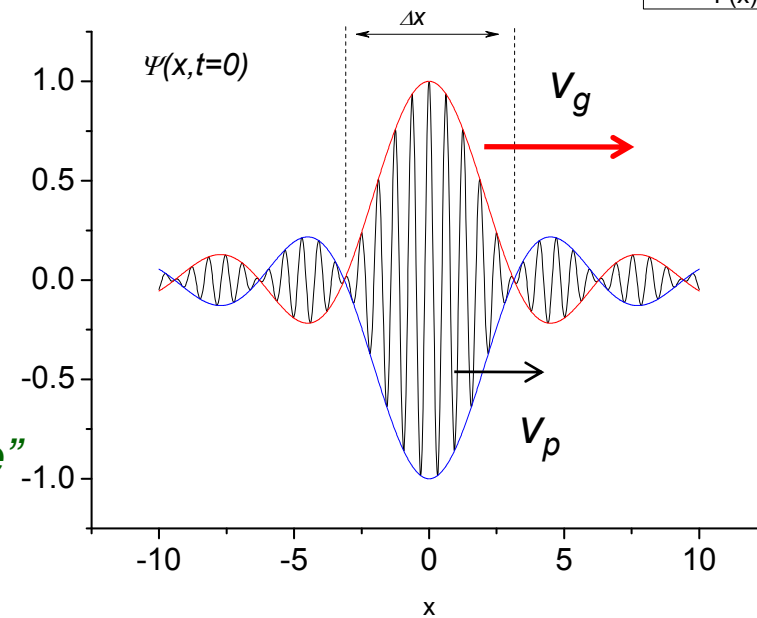
Esta propiedad da significado físico a la velocidad de grupo

* Los planos de igual fase: $k_0 x - \omega_0 t = cte = \text{“fase”}$ se mueven con la velocidad:

$$v_p \equiv \frac{\omega_0}{k_0}$$

* Es fácil comprobar que si $v_g = v_p (\forall k) \Leftrightarrow \omega = ck$, con $c = cte = v_p = v_g = \omega_0 / k_0$

En ese caso se cumple la ecuación de d'Alembert en 1D: $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$



8. Ecuación diferencial de la “onda de probabilidad” (partícula libre, no relativista, 1D)

1) Escribamos $\Psi(x,t)$ como un paquete de ondas: $\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk$

2) Calculemos las siguientes derivadas de $\Psi(x,t)$:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = - \int_{-\infty}^{\infty} k^2 g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk \quad (1) \quad \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i \int_{-\infty}^{\infty} \omega(k) g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk \quad (2)$$

3) Buscamos la ecuación que debe satisfacer $\Psi(x,t)$ para que $v_g = 2v_p$

Escribamos $\omega(k)$: $v_g = \frac{d\omega}{dk} = 2 \frac{\omega}{k} \Rightarrow \frac{d\omega}{\omega} = 2 \frac{dk}{k} \Rightarrow \ln \omega = \ln k^2 + cte \Rightarrow \omega = Ck^2$

Sustituimos en (2) y se llega por tanto a la siguiente ecuación importante:

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -iC \int_{-\infty}^{\infty} k^2 g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk = iC \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

Hasta aquí son propiedades matemáticas de todas las ondas.

4) Ahora, siguiendo a de Broglie queremos que para una onda monocromática sea:

$$p = \hbar k; \text{ y también } E = \hbar \omega = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \Rightarrow C = \frac{\hbar}{2m}$$

5) Sustituyendo C , queda la ecuación (tal como se suele escribir normalmente)

(Ecuación “de Schrödinger” para una partícula libre)

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

La ecuación de onda del fotón

Para una partícula relativista $E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$

El fotón tiene $m = 0$, luego: $E = pc$

Si aceptamos las relaciones de Planck y de Broglie: $E = \hbar \omega$; $p = \hbar k$

Llegamos a la conclusión de que

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = c; \quad v_g = \frac{d\omega}{dk} = c = v_p$$

Una onda plana: $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$

Satisface necesariamente (y cualquier paquete) la ecuación de d'Alembert:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2}$$

Una partícula relativista de masa en reposo $m \neq 0$ satisface una ecuación (“ec de Klein-Gordon”) que se reduce a la “de Schrödinger” cuando $v_p, v_g \ll c$.

9. El momento lineal

Cuando el estado de la partícula viene descrito por un paquete de ondas el momento no está determinado. Queremos obtener el valor medio a partir de Ψ

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= m \langle v \rangle = m \frac{d \langle x \rangle}{dt} = m \int x \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} dx = m \int_{-\infty}^{\infty} x \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) dx = \\ &= \frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi(x,t)^* \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi(x,t)^*}{\partial x} \Psi(x,t) \right] dx\end{aligned}$$

Integrando por partes ($u = x$, $dv = [...]dx$): $\langle p \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\Psi(x,t)^* \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi(x,t)^*}{\partial x} \Psi(x,t) \right] dx$

Ya que $\Psi(x \rightarrow \infty) = 0 \Rightarrow [uv]_{-\infty}^{\infty} = 0$

Integrando otra vez por partes se ve que los dos términos de la derecha son iguales.

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

Por supuesto este resultado es también $\langle p \rangle = mv_g = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} g^*(k) k g(k) dk = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} k |g(k)|^2 dk$

Así pues físicamente $|g(k)|^2$ da la densidad de probabilidad de que la partícula tenga el valor k (o $p = \hbar k$)

10. Valores “esperados”

$|\Psi(x,t)|^2 dx$ = probabilidad de encontrar la partícula en dx en el instante t

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \Psi \text{ debe ser “de cuadrado integrable”}.$$

Si la integral es un valor real no infinito, se puede dividir Ψ por la raíz cuadrada de la integral para obtener una función cuya probabilidad total sea 1

Valor “esperado” (medio) de la posición x : $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* x \Psi(x,t) dx$

Valor “esperado” del momento p : $\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} dx$

Valor “esperado” de cualquier magnitud física $F(x,p)$, “receta”:

1) Sustituir en la expresión de $F(x,p)$ $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

2) “Actuar” sobre Ψ con el “operador” obtenido: $\Psi \rightarrow F\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi$

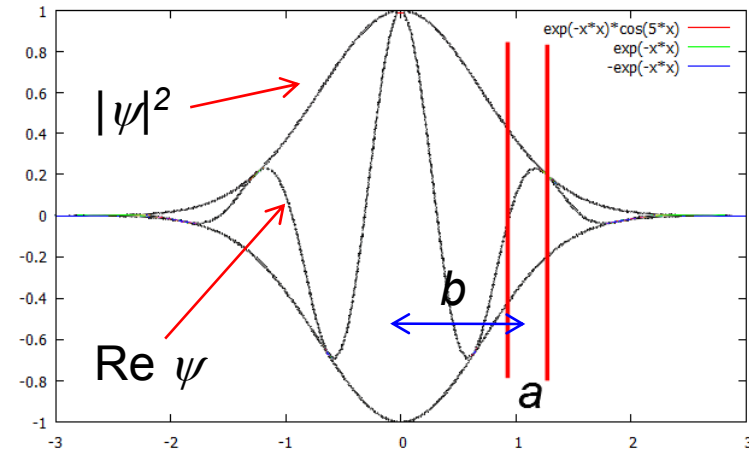
3) Calcular el llamado “producto escalar” (es decir **la integral**) de Ψ^* por $F\Psi$

$$\langle F \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* F \Psi(x,t) dx$$

11. ¿Interpretación probabilística “de Copenhague” o “variables ocultas”? I

Supongamos que queremos “medir” la posición x de una partícula cuyo estado está descrito por la función de onda $\Psi(x,t)$.

Para ello en el instante t bajamos dos paredes separadas una pequeña distancia a estando el centro en b . Tenemos una probabilidad $|\Psi(b,t)|^2 a$ de atrapar la partícula.



Si conseguimos atraparla, la partícula queda confinada entre las dos paredes y la probabilidad de estar fuera de ellas pasa a ser cero: la nueva función de onda sólo tiene amplitud entre $b-a/2$ y $b+a/2$.

En otras palabras la partícula está (aproximadamente) en el punto $x = b$, que es el resultado de la “medida” con una imprecisión a .

Una pregunta clave es: ¿dónde estaba la partícula justo antes de hacer la medida?

Interpretación por variables ocultas: “Dios no juega a los dados” (carta de A. Einstein a M Born)

Según esta interpretación (cargada todavía de prejuicios mecano-clásicos) ya que la partícula no puede saltar instantáneamente de otro sitio al punto b , la partícula ya estaba en b justo antes de la medida, pero no lo sabíamos.

Esta interpretación mantiene que la función de onda (y toda la MQ con ella) es una descripción incompleta del estado de la partícula y la descripción completa depende de variables ocultas que no podemos conocer.

Interpretación estadística o de Copenhague. “Dios juega a los dados, y a veces los tira donde nadie puede verlos” (S. Hawking)

Según esta interpretación la función de onda es una descripción completa del estado de la partícula y la probabilidad es una propiedad intrínseca.

Antes de la medida la partícula no está en ningún sitio con certeza. Hay una probabilidad no nula de encontrarla en cualquier parte, pero después de que la medida ha dado por casualidad el resultado b , ahora la función de onda corresponde a una partícula situada ciertamente en b (con la imprecisión de la medida a). Este efecto se llama colapso de la función de onda

Teorema de Bell

No vamos a tratarlo ahora en detalle pero John Bell (1964) mostró un posible experimento (en relación con la famosa paradoja de Einstein-Podolsky-Rosen), que permitiría discernir qué interpretación es la correcta, mediante un resultado experimental incompatible con una de las dos

El experimento fue realizado y publicado por A. Aspect, P. Grangier y G. Roger, Phys. Rev. Lett. 49, 91 (1982) y estaba en excelente acuerdo con la Mecánica Cuántica.

Estos resultados avalan los llamados entrelazamiento y teletransporte cuánticos : Si dos experimentadores intentan atrapar la partícula uno detrás de otro, en dos sitios distintos, si el primero la atrapa, instantáneamente (y a mayor velocidad que la luz) la probabilidad de que la atrape el segundo se reduce a CERO.

Esto no parece tan sorprendente pero es que si el primero no hace el experimento, las posibilidades del segundo están intactas.

Así pues en Mecánica Cuántica la medida no sólo obtiene información, sino que altera completamente el estado de la partícula.

La Medida en Mecánica Cuántica

Así pues en Mecánica Cuántica la medida **no sólo obtiene información**, sino que **altera completamente el estado de la partícula**, hasta el punto de que si inicialmente una propiedad no estaba determinada y la medimos,

podemos obtener distintos resultados (y no es porque el aparato de medida sea imperfecto)

Pero una vez que hemos obtenido un resultado dado P , **el estado de la partícula cambia a un nuevo estado** que corresponde a un valor P **perfectamente determinado** de la partícula.

Si realizamos el mismo experimento con muchas partículas todas ellas en el mismo estado cuántico inicial dado por la función de onda $\Psi(x,t)$, el resultado final será cada vez diferente, y en cada caso la nueva función de onda corresponderá a un valor distinto P .