El modelo cuántico que explica satisfactoriamente el átomo de hidrógeno, se obtiene aplicando la ecuación de Schrödinger a un problema de una partícula en tres dimensiones dentro de un campo electrostático. En ese modelo el electrón queda descrito por una función de onda  $\psi$  que satisface la ecuación de Schrödinger tridimensional, con un potencial coulombiano:

$$V(\mathbf{r}) = -\kappa \frac{e^2}{\mathbf{r}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\mathbf{r}}$$

donde  $\kappa$  es la constante de Coulomb, e es la carga eléctrica del electrón y r es la distancia al núcleo atómico,  $\epsilon_0$  es la constante dieléctrica del vacío. Este potencial modeliza la interacción entre el protón y el electrón. Gracias a la existencia de la simetría esférica la resolución puede simplicarse usando coordenadas esféricas. En la sección anterior vimos que la ecuación de onda independiente del tiempo de una partícula sometida a un potencial V( $\mathbf{r}$ ) en tres dimensiones es

$$(1a) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

donde E es la energía total del electrón. Escribiendo la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas, el laplaciano se escribe como:

$$(2)\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Ahora nuestra ecuación queda escrita

$$(1b)\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}(V(r) - E)\psi(r,\theta,\varphi) = 0$$

esta es una ecuación en derivadas parciales. Usando la técnica de separación de variables la convertimos en tres ecuaciones diferenciales ordinarias, pero se suele separar primero la parte radial de la angular, y eso quiere decir que la solución se reescribe como

 $\psi(r,\theta,\varphi) \ = \ R(r)Y(\theta,\varphi)$ 

de modo que la ecuación queda:

$$\frac{1}{R(r)} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{Y(\theta,\varphi)} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y(\theta,\varphi)} \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial \varphi^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) = 0$$

reordenando términos se puede escribir como

$$\frac{1}{R(r)} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) = -\frac{1}{Y(\theta,\varphi)} \left[ \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial \varphi^2} \right]$$

nótese que la parte izquierda de esta ecuación no depende de las variables de la parte derecha y viceversa, esto quiere decir que la única forma de satisfacer la igualdad es que ambas partes sean igual a una constante, para que la solución sea físicamente aceptable, la constante de separación debe ser l(l+1) de modo que se obtienen dos ecuaciones.

### Ecuación angular

La primera es conocida en física como los armónicos esféricos y es

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2} + l(l+1)Y(\theta,\varphi) = 0$$

y en efecto es la ecuación de Laplace en coordenadas esféricas, la solución a esta ecuación es  $Y(\theta, \varphi) = A_l^m e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta)$ 

con

$$A_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}$$

y los  $P_l^m(\cos \theta)$  los polinomios asociados de Legendre. Estos polinomios son finitos en 0 y  $\pi$  como lo requiere la función de onda aceptable, la forma de construir los polinomios es entre otras, mediane la fórmula de Rodrigues que para estos polinomios es

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} (x^2-1)^l$$

evaluando después la en  $x = \cos \theta$ , la razón por la que la constante de separación se eligió como l(l+1) fue justamente para que la solución fueran estos polinomios, dado que además de ser una solución conocida a la ecuación, es físicamente aceptable, la otra constante m aparece al aplicar el método de separación a la ecuación de los armónicos esféricos.

• 
$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2} + l(l+1)Y(\theta,\varphi) = 0$$

- $Y(\theta, \varphi) = A(\theta)B(\varphi)$
- $\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial A(\theta)}{\partial\theta} \right) B(\varphi) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 B(\varphi)}{\partial\varphi^2} A(\theta) + l(l+1)A(\theta)B(\varphi) = 0, /A(\theta)B(\varphi)$
- $\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial A(\theta)}{\partial\theta} \right) A(\theta)^{-1} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 B(\varphi)}{\partial\varphi^2} B(\varphi)^{-1} + l(l+1) = 0, \sin^2\theta$
- $\frac{\partial^2 B(\varphi)}{\partial \varphi^2} B(\varphi)^{-1} = -m^2, B(\varphi) = a e^{i m \varphi} + b e^{-i m \varphi}, B(\varphi + 2\pi) = B(\varphi)$
- $e^{im\varphi} = e^{im\varphi}e^{i2\pi m}$ ,  $m \in Z$
- $\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial A(\theta)}{\partial\theta} \right) + \left( l(l+1) \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right) A(\theta) = 0$

• 
$$\frac{1}{\operatorname{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \operatorname{sen}\theta \frac{\partial A(\theta)}{\partial\theta} \right) + \left( l(l+1) - \frac{m^2}{\operatorname{sen}^2\theta} \right) A(\theta) = 0$$

•  $A_{lm}(\theta) = \frac{(\sin \theta)^{|m|}}{2^l l!} \left[ \frac{d}{d(\cos \theta)} \right]^{l+|m|} (\cos^2 \theta - 1)^l$ , functiones asociadas de Legendre.

Ver E.T. Copson "Introduction to the theory of complex variables" Capítulo 11.

•  $A_{lm}(\theta)$  debe ser finita en  $\theta = 0, \pi$ . Por lo tanto l = 0, 1, 2... Además  $2l \ge l + |m|, l \ge |m|$ 

### Ecuación radial

La otra ecuación es de suma importancia, ya que su solución depende de la forma específica del potencial, de hecho para cualquier potencial esféricamente simétrico la solución anterior es válida, y la solución a esta parte de la ecuación de onda es característica de la forma específica del potencial electrostático, en efecto la ecuación queda

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( \frac{Q}{r} - E \right) R(r) = l(l+1)R(r)$$

donde se ha sustituido V(r) por el potencial electrostático mediante el cual interaccionan el protón y el electrón y aquí

$$Q = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

Haciendo el cambio

$$u(r) = rR(r)$$

se tiene que la ecuación se reescribe como

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Q}{r} - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + E\right) u(r) = 0$$

si ahora se hace un cambio de variable

$$E = -\frac{k^2 \hbar^2}{2\mu} \qquad \qquad \rho_0 = \frac{2\mu Q}{\hbar^2 k}$$

entonces la ecuación queda

$$\frac{1}{k^2} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left(\frac{\rho_0}{kr} - \frac{l(l+1)}{k^2 r^2} - 1\right) u(r) = 0$$
  
Sea

$$kr = \rho \qquad \Rightarrow \qquad \frac{d^2}{\mathrm{dr}^2} = k^2 \frac{d^2}{d\rho^2}$$

Entonces:

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho) + \left(\frac{\rho_0}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - 1\right)u(\rho) = 0$$

si se considera ahora que  $\rho{\rightarrow}\infty$  es claro que la ecuación queda

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) - u(\rho) &= 0, \ u(\rho) \sim a e^{\rho} + b e^{-\rho} \\ u(\infty) &= 0 \\ u(\rho) &\approx e^{-\rho} \end{aligned}$$

luego otra consideración asintótica,  $\rho \rightarrow 0$  el término que depende de  $1/\rho^2$  crece mucho más rápido que los demás términos, de donde se obtiene

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2}u(\rho) = 0, \ u(\rho) = c\rho^{\alpha}, \alpha(\alpha-1)\rho^{\alpha-2} - l(l+1)\rho^{\alpha-2} = 0,$$

 $(\alpha + l)(\alpha - l - 1) = 0$ ,  $\alpha = -l, l + 1$ 

y la solución debe ser finita en el origen.

 $u(\rho) \approx \rho^{1+l}$ 

# Supongamos que:

$$u(\rho) = e^{-\rho} \ \rho^{1+l} \ v(\rho)$$
  
$$\rho \frac{d^2 v}{d \rho^2} + 2 \left(l + 1 - \rho\right) \frac{d v}{d \rho} + \left(\rho_o - 2 \left(l + 1\right)\right) v = 0$$

$$\begin{split} \rho \frac{d^2 v}{d \rho^2} + 2 \left( l+1-\rho \right) \frac{d v}{d \rho} + \left( \rho_o - 2 \left( l+1 \right) \right) v &= 0 \\ v(\rho) &= \sum_{j=0}^{\infty} a_j p^j, \\ \sum_{j=0}^{\infty} j \left( j+1 \right) a_{j+1} p^j + 2 \left( l+1 \right) \sum_{j=0}^{\infty} a_{j+1} p^j - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j a_j p^j + \left( \rho_o - 2 \left( l+1 \right) \right) \sum_{j=0}^{\infty} a_j p^j = 0 \\ \therefore a_{j+1} &= \left( \frac{2 \left( j+l+1 \right) - \rho_o}{\left( j+1 \right) \left( j+2 l+2 \right)} \right) a_j, \ \frac{a_{j+1}}{a_j} \sim_{j \to \infty} \frac{2}{j}, v(\rho) \sim e^{2\rho} \end{split}$$

La serie debe ser un polinomio: $2(n'+l+1) - \rho_0 = 0$ ,  $n'=0, 1, 2, \dots, \rho_0 = 2n$ , n = n'+l+1

La relación de recurrencia queda como:

$$a_{j+1} = \frac{2(j+l+1-2n)}{(j+1)(j+2l+2)} a_j$$

La solución de esta recurrencia es  $v_n^l(x)$ . Se tiene

 $v_{q-p}^{p}(x) = \lambda \left(\frac{d}{dx}\right)^{p} \left(e^{x} \left(\frac{d}{dx}\right)^{q} e^{-x} x^{q}\right) = \lambda (-1)^{p} L_{q-p}^{p}, L_{q-p}^{p} \text{ son los polinomios asociados}$ 

de Laguerre.

$$R(r) = \frac{N}{a_0 n} \left(\frac{r}{a_0 n}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{n a_0}\right) L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2 r}{n a_0}\right), \ a_0 = \frac{4 \pi \epsilon_o \hbar^2}{m e^2} \text{ es el radio de Bohr y}$$

N es una constante de normalización. Se determina imponiendo que la probabilidad esté normalizada a 1.

$$N = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2 n (n+l)!}} \left(\frac{2}{n a_0}\right)^3$$

	Table 7-2	Radial functions for hydrogen
n = 1	$\ell = 0$	$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$
<i>n</i> = 2	$\ell = 0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
	$\ell = 1$	$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$
<i>n</i> = 3	$\ell = 0$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
	$\ell = 1$	$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) e^{-r/3a_0}$
	<i>ℓ</i> = 2	$R_{32} = \frac{4}{8\sqrt{30a_0^3}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$

### Espectro del H

En la solución de la parte radial de la ecuación del átomo de hidrógeno, apareció un nuevo entero positivo, n,  $n = \frac{\rho_0}{2}$ . Tenemos que:

$$\rho_0^2 = -\frac{2\mu Q}{\hbar^2 E} = 4n^2$$
 de donde claramente  $E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2 n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2$ 

que es un resultado coincidente con la experimentación, y además por si fuera poco con el modelo atómico de Bohr.

Reglas de selección:  $\Delta m = 0, \pm 1, \Delta l = \pm 1$ 

 $\Delta l = \pm 1$  y la conservación del momentum angular implica que el fotón tiene un momentum angular intrínseco (espín)  $s = \cancel{k}$ .

Los números cuánticos del átomo de H tienen los valores siguientes:

- n = 0, 1, 2...
- l = 0, 1...n 1
- m = -l, -l 1, ....l

## Probabilidades



**Figura 1.** P(r) (densidad de probabilidad radial) en el Nivel fundamental



Figura 2.  $P(r) \operatorname{con} n = 2$ 



**Figura 4.** Densidad de probabilidad para n = 3, tomando en cuenta la dependencia angular .

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -i \not \! / \vec{r} \times \vec{\nabla}$$

En coordenadas esféricas se tiene:

$$L_z = -i \not h \frac{\partial}{\partial \varphi}, \vec{L}^2 = -\not h^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

 $L_{z}Y(\theta,\varphi) = m \not h Y(\theta,\varphi), \ \vec{L}^{2}Y(\theta,\varphi) = \not h^{2}l(l+1)Y(\theta,\varphi), \ |m| \leq l, \ l = 0, 1, 2....$  $|\vec{L}| = L = \not h \sqrt{l(l+1)}$ 





#### Espín

La Tierra además de su movimiento orbital alrededor del Sol, tiene un movimiento de rotación alrededor de su eje. Por tanto, el momento angular total de la Tierra es la suma vectorial de su momento angular orbital y su momento angular de rotación alrededor de su eje.

Por analogía, un electrón ligado a un átomo también gira sobre sí mismo, pero no podemos calcular su momento angular de rotación del mismo modo que calculamos el de la Tierra en función de su masa, radio y velocidad angular.

La idea de que el electrón tiene un movimiento de rotación fue propuesta en 1926 por G. Uhlenbeck y S. Goudsmit para explicar las características de los espectros de átomos con un solo electrón. La existencia del espín (rotación) del electrón está confirmada por muchos resultados experimentales, y se manifiesta de forma muy directa en el experimento de Stern-Gerlach, realizado en 1924.

En la simulación de este experimento, se comprobará la existencia del espín del electrón observando que un haz de átomos se divide en dos trazas simétricas al eje X. A partir de la medida de la desviación del haz, determinaremos el valor del magnetón de Bohr.

La simulación es similar al experimento de Thomson que realizamos para determinar la naturaleza de los denominados rayos catódicos y medir la razón entre la carga y la masa del electrón.



Figura 6.

La Fig 6. muestra un electrón moviéndose en una órbita circular de radio r alrededor de núcleo. La corriente debida al movimiento del electrón es  $-\frac{e}{T}$ 

donde  $T = \frac{2\pi r}{v}$  es el período de la órbita. El momento dipolar magnético está dado por:  $\vec{\mu} = I \vec{A}$  donde  $A = \pi r^2$  es el área de la órbita.

 $\mu = \frac{ev}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{1}{2}evr$ . El momentum angular es: L = mvr.

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

L está cuantizado:  $L = n \frac{h}{2\pi}$ , donde  $h = 6.626 \times 10^{-34} Js$  es la constante de Planck.

$$\mu = n\mu_B, \ \mu_B = \frac{eh}{4\pi m} = 9.274 \times 10^{-24} A m^2 \text{ es el magnet} \acute{o}n \text{ de Bohr}$$

El electrón tiene un momentum angular intrínseco llamado espín. Asociado a éste hay también un momento magnético intrínseco. Se postula la existencia de un momento angular intrínseco del electrón llamado espín S . Como el electrón es una partícula cargada, el espín del electrón debe dar lugar a un momento magnético  $\mu$  intrínseco o de espín. La relación que existente entre el vector momento magnético y el espín es  $\vec{\mu} = -g \frac{e}{2m} \vec{S}$ ,donde g se denomina razón giromagnética del electrón, su valor experimental es aproximadamente 2.





El número de orientaciones del vector momento angular respecto a un eje Z fijo es 2S + 1, tenemos para el caso del espín S = 1/2 que la componente Z tiene dos valores permitidos  $S_z = \pm \frac{1}{2} \not/ k$ . Por lo que  $\mu_z = \pm \mu_B$ ,  $\mu_B = \frac{e\not/ k}{2m}$  es el magnetón de Bohr.

La energía de un dipolo magnético  $\mu$  en un campo magnético B que tiene la dirección del eje Z es el producto escalar

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B = \pm \mu_B B$$







En (a) $\vec{\mu}$  and  $\vec{B}$  tienen direcciones opuestas. La fuerza tiene una componente radial nula. La fuerza neta es a la derecha en la dirección de menor campo.

En (b) $\vec{\mu}$  and  $\vec{B}$  tienen la misma dirección. La fuerza tiene una componente radial nula. La fuerza neta es a la izquierda en la dirección de mayor campo.

En efecto, tenemos que: $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$ , donde Ues la energía potencial del dipolo magnético. Con lo cual:

$$\vec{F} = \vec{\nabla} \big( \, \vec{\mu} \, . \vec{B} \, \big)$$

# Stern-Gerlach

El **experimento de Stern y Gerlach**, nombrado así en honor de los físicos alemanes Otto Stern y Walther Gerlach, es un famoso experimento realizado por primera vez en 1922 sobre la deflexión de partículas y que ayudó a sentar las bases experimentales de la mecánica cuántica. Puede utilizarse para ilustrar que los electrones y átomos tienen propiedades cuánticas intrínsecas, que las medidas afectan a las propiedades de las partículas medidas y que los estados cuánticos son necesariamente descritos por medio de números complejos.



Figura 8.

El experimento de Stern-Gerlach consistía en enviar un haz de átomos de plata a través de un campo magnético inhomogéneo. El campo magnético crecía en intensidad en la dirección perpendicular a la que se envía el haz. El espín de los diferentes átomos fuerza a las partículas de espín positivo +1/2 a ser desviadas hacia arriba y a las partículas de espín opuesto -1/2 a ser desviadas en el sentido contrario siendo capaz por lo tanto de medir el momento magnético

de las partículas.

En el caso clásico no cuántico una partícula cualquiera con un momento magnético entrará en el campo magnético con su momento magnético orientado al azar. El efecto del campo magnético sobre tales partículas clásicas ocasionaría que fueran desviadas también en sentidos opuestos pero dependiendo el grado de deflexión del ángulo inicial entre el momento magnético y el campo magnético al que se somete el haz. Por lo tanto algunas partículas serían desviadas fuertemente, otras de manera más débil y progresivamente se irían encontrando partículas desviadas en ambas direcciones cubriendo todo el espectro de intensidades posibles.

Sin embargo, el experimento de Stern-Gerlach pone de manifiesto que esto no es así y se observa que todas las partículas son desviadas o bien hacia arriba o bien abajo pero ambos grupos con la misma intensidad. Las partículas tienen o bien espín  $\frac{1}{2}$   $\cancel{k}$  o  $-\frac{1}{2}$   $\cancel{k}$ , sin valores intermedios.



Figura 9. El espín está cuantizado.

El momento magnético m del átomo puede medirse mediante esta experiencia y es igual en módulo al magnetón de Bohr  $m_B$ .

Si se encadenan varios experimentos de Stern y Gerlach sucesivamente, se verifica que no actúan simplemente como medidas pasivas, sino que alteran el estado de las partículas medidas, como la polarización de luz, o la proyección sobre cierto eje del momento angular de espín, de acuerdo con las predicciones de la mecánica cuántica. En la figura se muestra, de arriba a abajo:

 El haz seleccionado como z<sub>+</sub> sólo contiene partículas con el valor propio + para el operador z

- El haz seleccionado como z<sub>+</sub> contiene partículas con valor propio + y con valor propio para el operador x
- Tras haber sido medido el valor propio del operador x, las partículas que previamente tenían valor + para el operador z han sido restablecidas a una mezcla para los valores + y -.



Figura 10. Experimentos Stern-Gerlach en secuencia: la observación altera los estados cuánticos.

Si B es variable en la dirección Z, el dipolo magnético experimenta una fuerza

 $\vec{F} = \vec{\nabla} (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \pm \mu_B \frac{dB}{dz}$ , que lo desviará de su trayectoria rectilínea.

Si el dipolo magnético es paralelo al campo magnético, tiende a moverse en la dirección en la que el campo magnético aumenta, mientras que si el dipolo magnético es antiparalelo al campo magnético se moverá en la dirección en la que el campo magnético disminuye.

Figura 11. Fuerza

En el experimento se usa un haz de átomos hidrogenoides, como plata, litio, sodio, potasio y otros que constan de capas electrónicas completas salvo la última en la que tienen un electrón. El momento angular orbital l de dicho electrón es cero, por lo que está en el estado s.

Se selecciona un haz de átomos de una velocidad dada y se le hace atravesar una región en la que existe un campo magnético no homogéneo, tal como se muestra en la figura.



Figura 12. Dispositivo S-G

# Movimiento del átomo en la región en la que se ha establecido un gradiente de campo magnético

Suponiendo que el gradiente de campo magnético es constante, la aceleración a lo largo del eje Z es constante, a lo largo del eje X es cero. Tenemos un movimiento curvilíneo bajo aceleración constante.

$$a_x = 0, \quad v_x = v, \quad x = vt$$
$$a_z = \frac{F_z}{m}, \quad v_z = \frac{F_z}{m}t, \quad z = \frac{1}{2}\frac{F_z}{m}t^2$$



Figura 13. Movimiento parabólico

Si la región en la que hay un gradiente de campo magnético tiene una anchura L, la desviación que experimenta el haz, véase la figura 6, vale  $z_0 = \frac{1}{2} \frac{F_z}{m} \left(\frac{L}{v}\right)^2$ 

# Movimiento del átomo fuera de dicha región

Cuando el átomo de masa m abandona la región en la que hay un gradiente de campo magnético, sigue una trayectoria rectilínea con velocidad igual a la que tenía al abandonar la citada región. Las componentes de la velocidad serán  $v_x = v$ ,  $v_z = \frac{F_z}{m} \left(\frac{L}{v}\right)$ 



Figura 14.

La desviación total en la pantalla será  $d = z_0 + v_z \frac{D}{v_x} = \frac{1}{2} \frac{F_z}{m} \left(\frac{L}{v}\right)^2 + \frac{F_z}{m} \left(\frac{DL}{v^2}\right) = \frac{\mu_B}{m} \frac{dB}{dz} \frac{L}{v^2} \left(\frac{1}{2}L + D\right)$ 

Midiendo d despejamos en dicha ecuación el valor  $\mu_B$  del magnetón de Bohr.

# Espín-Orbita

Momento angular total  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ . Cantidad conservada si no hay torques externos.

Regla de suma de momentos angulares en Mecánica Cuántica:

1. 
$$\left| \vec{J} \right| = \hbar \sqrt{j(j+1)}$$
,  $\left| l-s \right| \leq j \leq l+s$   
2.  $J_z = m_j \hbar$ ,  $\left| m_j \right| \leq j$ 





**Figura 15.**  $l = 1, s = \frac{1}{2}$ 

**Figura 16.**  $l = 1, s = \frac{1}{2}$ 

Ejemplo 1:Dos electrones tienen momento angular orbital igual a cero cada uno. Encontrar los posibles valores del momento angular total.

R:  $s \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ ,  $s \geq 0$ , s = 1, 0, paralelo y antiparalelo.

Ejemplo 2: Un electrón en un átomo tiene momento angular  $l_1 = 2$ , otro electrón del átomo tiene  $l_2 = 3$ . Qué valores toma el momento angular orbital total.

 $\mathsf{R}: l \leq 2+3=5, \ l \geq 3-2=1, \ l=5, 4, 3, 2, 1$ 

Antes de que se entendieran adecuadamente los orbitales atómicos, los estudios espectroscópicos descubrieron series de líneas espectrales en los espectros atómicos, que distinguieron por letras. Más tarde se asociaron estas letras al número cuántico azimutal, l. Las letras «s», «p», «d» y «f» se eligieron por ser las iniciales en inglés de fino, principal, diffuso y fundamental (sharp, principal, diffuse y fundamental), y se continuó asignando letras en orden alfabético, omitiendo la «j»:

letra	nombre	1
S	<b>s</b> harp	0
р	<b>p</b> rincipal	1
d	<b>d</b> iffuse	2
f	<b>f</b> undamental	3
g		4
h		5
i		6
k		7
I		8

Esta notación se usa para especificar configuraciones electrónicas y para crear el término espectroscópico para los estados electrónicos en un átomo polielectrónico.

En un átomo de sólo un electrón los niveles de energía se llaman capas:K,L,M,N,O correspondientes al número cuántico principal n = 1, 2, ...

Estado P:  $n^{2s+1}P_j$  tiene l=1, espins, momentum angular total j.número cuántico principal n.





Figura 17.

Figura 18.

$$U\!=\!-\vec{\mu}.\vec{B}$$
 ,  $\vec{\mu}=\!-\frac{ge}{2m}\vec{S}$  ,  $\vec{B}=\!\lambda\,\vec{L}$  ,  $U\!=\!\frac{ge\lambda}{2m}\vec{S}.\vec{L}$ 



Figura 19.

Encontremos el campo magnético en el punto O.  $\vec{B} = \frac{\mu_0}{2\pi} \vec{\mu}_P a^{-3}$ ,  $\vec{\mu}_P = \frac{e}{2m_P} \vec{L}$ ,  $\lambda = \frac{\mu_0}{2\pi} \frac{e}{2m_P r^3}$ 



## Figura 20.

Estructura fina debida al acoplamiento S L

A la izquierda se muestran los niveles sin campo magnético.

## Efecto Zeeman

- Ponemos un átomo en presencia de un campo magnético externo  $\vec{B} = B_0 \hat{z}$ .
- El átomo tiene un momento magnético  $\vec{\mu} = \alpha \vec{J}$  donde  $\vec{J}$  es el momento angular total.
- El campo magnético externo, separa los niveles de energía del átomo de acuerdo a  $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\alpha B_0 J_z = -\alpha B_0 m_j \not/$ ,  $m_j = -j, -j + 1....j$
- La separación de las líneas espectrales debido al campo magnético es el efecto Zeeman.

En el átomo de Hidrógeno los niveles  $n = 2, l = 0, j = \frac{1}{2} \left( 2^2 S_{\frac{1}{2}} \right)$  y  $n = 2, l = 1, j = \frac{1}{2} \left( 2^2 P_{\frac{1}{2}} \right)$  son degenerados. La estructura fina no los separa.

En 1947, Willis Lamb descubrió que estos dos niveles tienen una pequeña diferencia de energía, lo que permite una transición  $2^2 S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2^2 P_{\frac{1}{2}}$ . La energía del fotón emitido es  $4.372 \times 10^{-6}$ eV.

Esto sólo se entiende en Electrodinámica Cuántica.

Las **partículas idénticas** son partículas que no pueden ser distinguidas entre sí, incluso en principio. Tanto las partículas elementales como partículas microscópicas compuestas (como protones o átomos) son idénticas a otras partículas de su misma especie.

En física clásica, es posible distinguir partículas individuales en un sistema, incluso si tienen las mismas propiedades mecánicas. O bien se puede etiquetar o "pintar" cada partícula para distinguirla de las demás, o bien se puede seguir con detalle sus trayectorias. Sin embargo, esto no es posible para partículas idénticas en mecánica cuántica. Las partículas cuánticas están especificadas exactamente por sus estados mecanocuánticos, de forma que no es posible asignarles propiedades físicas o etiquetas adicionales, más allá de un nivel formal. Seguir la trayectoria de cada partícula también es imposible, ya que su posición y su momento no están definidas con exactitud simultáneamente en ningún momento.

Esto tiene consecuencias importantes en mecánica estadística. Los cálculos en mecánica estadística se basan en argumentos probabilísticos, que son sensibles a si los objetos estudiados son idénticos o no. Así pues, las partículas idénticas exhiben un comportamiento estadístico "masivo" marcadamente distinto del de las partículas clásicas (distinguibles). Esto se desarrolla abajo.

La "identidad" de las partículas está ligada a la simetría de los estados mecanocuánticos tras el intercambio de las etiquetas de las partículas. Esto da lugar a dos tipos de partículas que se comportan de diferente forma, llamadas fermiones y bosones. (también hay un tercer tipo, anyones y su generalización, plektones). Lo que sigue se deriva del formalismo desarrollado en el artículo formulación matemática de la mecánica cuántica.

Si se considera un sistema con dos partículas idénticas, se puede suponer que el vector de estado de una partícula es  $|\psi\rangle$ , y el vector de estado de la otra partícula es  $|\psi\rangle$ . Se puede representar el estado del sistema combinado, que es una combinación no especificada de los estados de una partícula, como:

# $|\psi\psi'\rangle$ .

Si las partículas son idénticas, entonces (i) sus vectores de estados ocupan espacios de Hilbert matemáticamente idénticos, y (ii)  $|\psi\psi\rangle > y |\psi\psi\rangle > han de tener la misma probabilidad de colapsar a cualquier otro estado multipartícula <math>|\varphi\rangle$ :

# $|{<}\phi|\psi\psi'\rangle|^2\!=\!|{<}\phi|\psi'\psi\rangle|^2$

Esta propiedad se llama simetría de intercambio. Una forma de satisfacer esta simetría es que la permutación sólo induzca una fase:

 $\left|\psi\psi'\right\rangle \!=\!e^{i\alpha}\left|\psi'\psi\right\rangle$ 

Sin embargo, dos permutaciones han de conducir a la identidad (puesto que las etiquetas han vuelto a sus posiciones originales), luego se requiere que  $e^{2i\alpha} = 1$ . Entonces, o bien

 $|\psi\psi'\rangle=+\,|\psi'\psi\rangle$ 

que se llama un estado totalmente simétrico, o

 $|\psi\psi'\rangle = - |\psi'\psi\rangle$ 

que se llama estado totalmente antisimétrico.

Las partículas que exhiben estados totalmente antisimétricos se llaman fermiones. La antisimetría total da lugar al principio de exclusión de Pauli, que prohibe que fermiones idénticos estén en el mismo estado cuántico, esta es la razón de la tabla periódica, y de la estabilidad de la materia. El principio de exclusión de Pauli lleva a la estadística de Fermi-Dirac, que describe sistemas de muchos fermiones idénticos.

Las partículas que exhiben estados totalmente simétricos se llaman bosones. A diferencia de los fermiones, los bosones idénticos pueden compartir estados cuánticos. A causa de esto, los sistemas con muchos bosones idénticos se describen por la estadística de Bose-Einstein. Esto da lugar a fenómenos variados como el láser, el condensado de Bose-Einstein y la superfluidez.

Teorema de espín y estadística: Las partículas de espín entero son bosones. Las partículas de espín semientero son fermiones.

En Teoría Cuántica de Campos, se muestra que el Teorema de Espín y Estadística se debe a la Positividad de la Energía, a la localidad y a la invarianza de Lorentz.