

**Programa de Física Cuántica – Curso 2017**  
**Carrera: Física Médica**

- 1) Introducción a la Mecánica Cuántica: Radiación de cuerpo negro y ley de Planck; efecto fotoeléctrico; cuantización de la energía en los átomos: espectros atómicos y experiencia de Franck y Hertz. Modelo de Bohr para átomos hidrogenoides, aplicación a las series de emisión del hidrógeno y comparación con los valores experimentales. Rayos X. Hipótesis ondulatoria de De Broglie. Interpretación probabilística de la Mecánica Cuántica. Principio de superposición. Principio de Incerteza de Heisenberg: tiempo-energía; impulso-coordenada cartesiana.
- 2) Postulados de la Mecánica Cuántica para una partícula: espacios vectoriales equipados con un producto escalar hermítico. Estado cuántico en el espacio de coordenadas; propiedades de la función de Onda de Probabilidad; magnitudes observables y sus operadores hermíticos asociados; valores medios de los observables. Relaciones de conmutación canónicas. Observables no conmutantes y el principio de Incerteza. Operador Hamiltoniano  $H$  y ecuación de Schrödinger. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y estados propios de  $H$ . Cuantización de la energía en los autoestados ligados o estacionarios. Evolución temporal de un estado cuántico arbitrario e interpretación probabilística en las mediciones de un observable, en términos de las autofunciones de  $H$ . Magnitudes conservadas. Límite Clásico de la Mecánica Cuántica: Teorema de Ehrenfest y conexión entre conmutadores y corchetes de Poisson.
- 3) Aplicaciones de la ecuación de Schrödinger a la dinámica de una partícula en una dimensión: partícula libre; potencial de barrera cuadrada (o escalón); potencial repulsivo de pozo cuadrado (coeficientes de transmisión y reflexión, efecto túnel); potencial atractivo de pozo cuadrado: coeficientes de transmisión y reflexión, autoestados ligados; ejemplos (cadenas de carbono longitudinales). Sistemas cíclicos; ejemplos (molécula de benceno). Oscilador armónico simple: cálculo exacto de sus autofunciones (en términos de polinomios de Hermite) y autoenergías, cálculo de valores medios e incerteza coordenada-impulso. Resolución del problema empleando la formulación de Dirac. Aplicaciones a los espectros de vibración de las moléculas diatómicas. Límite clásico de la distribución de probabilidad del oscilador cuántico.
- 4) Ecuación de Schrödinger para una partícula en tres dimensiones. Ejemplos en coordenadas cartesianas: autofunciones para una caja rectangular de potencial atractivo, y para un oscilador armónico tridimensional. Operador Impulso angular  $L$ : relaciones de conmutación entre sus componentes cartesianas. Campo de fuerza central con simetría esférica. Operador Hamiltoniano  $H$  y ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas. Autovalores y autoestados de  $L^2$  y  $L_z$  (armónicos esféricos) y ecuación de Schrödinger radial. Potencial de escalón esférico. Estados estacionarios de un átomo hidrogenoide: funciones radiales en términos de polinomios de Laguerre y distribución de probabilidad electrónica radial. Energías discretas de los estados ligados: número cuántico orbital  $n$ , degeneración (estructura de capas) asociada a los números cuánticos  $(n, l, m)$ . Comparación con las predicciones del modelo de Bohr. Rotador rígido cuántico y aplicación al espectro de rotación de moléculas diatómicas. Ecuación de Schrödinger radial para moléculas diatómicas, espectro de rotación-vibración y potencial empírico de Morse.
- 5) Interacción magnética: momento magnético orbital y su relación con el operador  $L$ , magnetón de Bohr y factor giromagnético. Cuantización de las proyecciones del momento magnético. Efectos inducidos por un campo magnético externo: frecuencia de Larmor y efecto Zeeman: remoción de la degeneración entre niveles de la misma subcapa  $(n, l)$  (multiplete  $l m_l$ ). Experimento de Stern-Gerlach, momento magnético, spin  $S$  y proyección de spin  $m_s$  del electrón. Espinores y función de onda de un electrón. Matrices de Pauli. Campo central: impulso angular total  $J$  de un electrón; interacción spin-órbita y remoción parcial de la degeneración entre niveles de la misma subcapa  $(n, l)$  (multiplete  $j m_j$ ). Números cuánticos conservados asociados al estado de un electrón (en función de los autovalores de  $J, J_z, L, S$ ). Interacción hiperfina.
- 6) Mecánica cuántica aplicada a un sistema de partículas idénticas. Partículas de spin entero (bosones) y semientero (fermiones). Principio de exclusión de Pauli. Funciones de onda simétricas y antisimétricas. La ecuación de Schrödinger para un sistema de muchas partículas. Átomos con más de un electrón: aproximación de campo promedio central y clasificación de las capas y subcapas (multipletes), según los números cuánticos orbitales hidrogenoides. Orbitales electrónicos independientes y determinante de Slater. Capas cerradas y electrones de valencia: tabla periódica de los elementos y explicación cualitativa del enlace químico. Aplicación del principio variacional para estimar las energías electrónicas. Ejemplos: átomo de He, transiciones electrónicas entre capas internas (rayos X característicos), y entre capas externas o de valencia (espectro de átomos alcalinos).
- 7) Interacciones magnéticas residuales en átomos con muchos electrones: acoplamientos  $L - S$  (átomos con  $Z$  pequeño), acoplamientos  $J - J$  (átomos con  $Z$  grande); separación entre los niveles de energía de un mismo multiplete debida a la interacción spin-órbita. Ejemplos: el doblete del Na debido a la interacción spin-órbita, efecto Zeeman según los esquemas  $L - S$  ó  $J - J$ .
- 8) Principio variacional sobre los valores medios de  $H$ . Funciones variacionales y cálculo aproximado de las autoenergías. Teoría de perturbaciones. Expresión de un estado cuántico en una base de autofunciones conocidas. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo; ejemplos. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Rapidez de transición (Regla de oro de Fermi); ejemplos. Ecuación de Schrödinger

en una base de autoestados (forma matricial); diagonalización de la matriz hamiltoniana y cálculo de autovalores. Aplicación al estudio de un sistema de dos niveles: evolución temporal del estado perturbado y frecuencia de transición; ejemplos (molécula de amoníaco).

- 9) Transiciones inducidas por un campo electromagnético variable (armónico) en el tiempo. Reglas de selección. Ejemplos: transiciones inducidas en átomos; resonancia paramagnética (spin) electrónica EPR (ESR); resonancia magnética nuclear (NMR); bandas de transición rotación-vibración en moléculas diatómicas
- 10) Moléculas: métodos cuánticos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger. La aproximación de Born-Oppenheimer. Aplicación del principio variacional. Las moléculas de  $H_2^+$  y  $H_2$ .

### Bibliografía

1. *Fundamentos de Física Moderna*: R. M. Eisberg; (1997), Limusa, S.A. de C.V.- México.
2. *Física Cuántica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*: R. Eisberg y R. Resnick; (2002), Limusa S.A. de C.V.- México.
3. *Introducción a la Mecánica Cuántica*: L. de la Peña; (1979), Cia. Continental - México.
4. *Fundamentos Cuánticos y Estadísticos*: M. Alonso y E. Finn; (1986), Addison- Wesley.
5. *Física II*, R. Serway y J. W. Jewett; (2004), Thomson – México.
6. *Física Moderna*, P. Tipler (1989), Ed. Reverté- Barcelona.
7. *Conceptos de Física Moderna*: A. Beiser; (1970) 5th Ed., McGraw-Hill.
8. *Mecánica Cuántica*: Feynman, Leighton, Sands (1987), Addison- Wesley.
9. *Modern Physics*: F. J. Blatt; (1992), McGraw-Hill Inc. New York.
10. *Principles of Modern Physics*: R. B. Leighton; (1959), McGraw-Hill.
11. *Quantum Mechanics*: E. Merzbacher; (1998) 3rd Ed., John Wiley and Sons.
12. *Quantum Mechanics 1 y 2*: A. Messiah; (1963), North-Holland Pub.Co. - Amsterdam.
13. *Quantum Mechanics 1 y 2*: C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë; (1996), J.Wiley & Sons.
14. *Quantum Mechanics*: L. I. Schiff; (1968) 3rd Ed. McGraw-Hill, Inc.
15. *Introduction to Quantum Mechanics (with applications to Chemistry)*: L. Pauling y E. B. Wilson; (1935) McGraw-Hill.
16. *Quantum Mechanics in Chemistry*: M. W. Hanna; (1981) 3rd Ed., The Benjamin/Cummings Pub.Co. Inc. USA.
17. *Introduction to Quantum Mechanics (in Chemistry, Materials Science and Biology)*: S. M. Blinder; (2004), Elsevier Academic Press – USA.
18. *Spectra of Diatomic Molecules*: G. Herzberg; (1950), D. Van Nostrand Inc., Princeton.
19. *Elementary Quantum Chemistry*: F. L. Pilar; (1990) 2nd Ed., McGraw-Hill Inc. New York.
20. *Quantum Theory of Molecular Electronic Structure*: R. G. Parr; (1963), Benjamin Inc. New York.
21. *The Theory of the Electronic Spectra of Organic Molecules*: J. N. Murrell; (1963), J. Wiley & Sons Inc. New York.
22. *Introduction to Magnetic Resonance*: A. Carrington y A. D. McLachlan; (1967) Harper and Row New York. Reimpreso en 1979 por Halsted Press.

Profesora: Dra. Norma Canosa – Año 2017