

Programa de Física Cuántica – Curso 2021
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. Series de emisión del hidrógeno. Rayos X. Hipótesis ondulatoria de De Broglie. Experimento de la doble rendija. Interpretación probabilística de la Mecánica Cuántica. 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. Principio de superposición. 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.
- 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. 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. Estados degenerados. Rotador rígido cuántico. Ejemplos. 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. 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: degeneración (estructura de capas) asociada a los números cuánticos (n, l, m) . Comparación con las predicciones del modelo de Bohr.
- 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. Átomo de Helio. Capas cerradas y electrones de valencia: tabla periódica de los elementos y explicación cualitativa del enlace químico.
- 7) Interacciones magnéticas residuales en átomos con muchos electrones: acoplamiento $L - S$ (átomos con Z pequeño), acoplamiento $J - J$ (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) Moléculas diatómicas. Enlaces iónico y covalente. Molécula de ClNa . Las moléculas de H_2^+ y H_2 . Rotador rígido cuántico y aplicación al espectro de rotación de moléculas diatómicas. Espectros de vibración de las moléculas diatómicas. Ecuación de Schrödinger radial para moléculas diatómicas, espectro de rotación-vibración y potencial empírico de Morse. Bandas de transición rotación-vibración en moléculas diatómicas
- 9) 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).

- 10) 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).

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. *Física Moderna*, P. Tipler (1989), Ed. Reverté- Barcelona.
4. *Conceptos de Física Moderna*: A. Beiser; (1970) 5th Ed., McGraw-Hill.
5. *Fundamentos Cuánticos y Estadísticos*: M. Alonso y E. Finn; (1986), Addison-Wesley.
6. *Introducción a la Mecánica Cuántica*: L. de la Peña; (1979), Cia. Continental – México.
7. *Introduction to Quantum Mechanics*: D. Griffiths (2004) 2nd Ed., Pearson Prentice Hall.
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. *Introduction to Quantum Mechanics (with applications to Chemistry)*: L. Pauling y E. B. Wilson; (1935) McGraw-Hill.
15. *Quantum Mechanics in Chemistry*: M. W. Hanna; (1981) 3rd Ed., The Benjamin/Cummings Pub.Co. Inc. USA.
16. *Introduction to Quantum Mechanics (in Chemistry, Materials Science and Biology)*: S. M. Blinder; (2004), Elsevier Academic Press – USA.
17. *Spectra of Diatomic Molecules*: G. Herzberg; (1950), D. Van Nostrand Inc., Princeton.
18. *Elementary Quantum Chemistry*: F. L. Pilar; (1990) 2nd Ed., McGraw-Hill Inc. New York.
19. *Quantum Theory of Molecular Electronic Structure*: R. G. Parr; (1963), Benjamin Inc. New York.
20. *The Theory of the Electronic Spectra of Organic Molecules*: J. N. Murrell; (1963), J. Wiley & Sons Inc. New York.
21. *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 2021