

Física Moderna

Radouane Gannouji

*Instituto de Física,
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso,
Avenida Universidad 330,
Curauma, Valparaíso, Chile*

*<https://www.fis.ucv.cl/rgannouji>
radouane.gannouji@pucv.cl*

Estos apuntes de clase de la Ingeniería Civil Informática, Ingeniería Civil en Ciencia de Datos están basado en varios libros:

- Modern physics for scientists and engineers, "*Stephen T. Thornton, Andrew Rex*"

Un libro escrito para ingenieros, con un nivel adaptado a este curso. Cada capítulo tiene varios ejemplos para practicar. Muy recomendable.

- Modern Physics, "*Paul A. Tipler, Ralph Llewellyn*"

Un libro muy similar a lo anterior con las respuestas a todos los ejercicios en este libro Instructor Solutions Manual.

- Quantum Computer Science, An Introduction, "*N. David Mermin*"

Un excelente libro para aprender sobre la segunda revolución cuántica. Las explicaciones son claras y muchos ejemplos son presentados.

- The Physics of Quantum Information, Quantum Cryptography, Quantum Teleportation, Quantum Computation, "*Editors: Dirk Bouwmeester, Artur Ekert, Anton Zeilinger*"

Un libro más explícito que el libro previo. Enfocándose en 3 de los temas centrales en la información cuántica.

- Quantum Computation and Quantum Information, "*M. A. Nielsen and I. L. Chuang*"

Un libro mucho más profundo en las fundaciones de la mecánica cuántica.

Contenido

I	Teoría cuántica antigua	4
1.	El nacimiento de la física moderna	4
1.1	Mecánica	4
1.2	Electromagnetismo	5
1.3	Física estadística	9
1.3.1	Teorema de equipartición	10
1.3.2	Distribución de Maxwell-Boltzmann	12
1.4	Los fundamentos de la física	13
2.	Las bases experimentales de la física cuántica	14
2.1	Descubrimiento de los rayos X y el electrón	14
2.2	Espectros de línea y ecuación de Rydberg	16
2.3	El cuerpo negro	17
2.4	Ley de Rayleigh-Jeans	19
2.5	La solución de Planck	21
2.6	El efecto fotoeléctrico	22
2.7	El efecto Compton	25
3.	La estructura del átomo	30
3.1	El modelo atómico de Thomson	30
3.2	El modelo atómico de Rutherford	30
3.3	El modelo de Bohr	32
II	Mecánica cuántica	35
4.	Propiedades ondulatorias de la materia	35
4.1	Dualidad onda-corpúsculo	35
4.2	Indeterminación de Heisenberg	39

5. Ecuación de Schrödinger	43
5.1 El pozo cuadrado infinito	45
5.2 Barrera de potencial y efecto túnel	47
5.3 El pozo potencial rectangular	50
5.4 Modelo de Kronig-Penney	53
5.5 El átomo de hidrógeno	57
5.6 Sistema con muchos electrones	71
6. El espín	74
6.1 Momento magnético	74
6.2 Experimento de Stern y Gerlach	77
6.3 Magnetismo	80
6.4 Espintrónica	82
7. Física nuclear	85
7.1 Radioactividad β	91
7.2 Radioactividad α	92
7.3 Fusión y Fisión	93
III Computación cuántica	96
8. El espín como sistema cuántico bidimensional	96
9. Notación bra-ket	99
10. El qubit	100
10.1 Múltiples qubits	101
10.2 Medición de un qubit	102
10.3 Transformaciones sobre los qubit	104
10.3.1 Puerta de Hadamard	104
10.3.2 Matrices de Pauli	106
10.4 Teorema de no clonación	107
11. Puerta NOT controlada	108
11.1 Definición	108
11.2 Estados de Bell	110
11.3 Medida del estado de Bell	112
11.4 Codificación superdensa	113

11.5	Teleportación cuántica	113
12.	Criptografía cuántica	116
12.1	Libreta (cuántica) de un solo uso	117
12.2	Distribución de claves cuánticas	119

Teoría cuántica antigua

1. El nacimiento de la física moderna

A finales del siglo XIX ya se sabía mucho sobre el comportamiento de los objetos sometidos a fuerzas de distinto tipo. Pero la obtención de estos conocimientos había sido un camino largo y difícil, con aportaciones de varios grandes científicos. Por ejemplo, las leyes de la mecánica empezaron a tomar forma realmente con los trabajos de Galileo Galilei (1564-1642), que realizó varios experimentos que sirvieron de inspiración a generaciones de científicos posteriores. Fue el primero, por ejemplo, en utilizar el telescopio para estudiar sistemáticamente el cielo y revelar los movimientos de los planetas y sus satélites. Estas observaciones están estrechamente relacionadas con el trabajo de Johannes Kepler (1571-1630), quien derivó las llamadas Leyes de Kepler para describir los movimientos de los planetas dentro de nuestro sistema solar. Estas leyes empíricas fueron explicadas posteriormente por Isaac Newton (1642-1727).

Pero el estado de los conocimientos a finales del siglo XIX no se limitaba simplemente a las leyes de la mecánica o a su aplicación a la astronomía, por ejemplo. Se produjeron enormes avances con el desarrollo de dos importantes teorías cuya formulación culminó en la segunda mitad del siglo XIX: el electromagnetismo y la termodinámica. A continuación resumimos muy brevemente estas teorías (incluida la mecánica) tal y como se entendían en aquella época.

1.1 Mecánica

Fue Isaac Newton quien introdujo por primera vez los conceptos de masa y fuerza. A partir de estos conceptos o principios, pudo establecer tres leyes fundamentales del movimiento (las leyes de Newton) en las que se basa gran parte de la física clásica:

- Un cuerpo permanece en reposo o en movimiento uniforme a menos que actúe sobre él una fuerza neta.
- Un cuerpo sobre el que actúa una fuerza neta se mueve de tal manera que la razón de cambio temporal del momento es igual a la fuerza.
- Si dos cuerpos ejercen fuerzas entre sí, estas fuerzas son iguales en magnitud y opuestas en dirección.

La Primera Ley carecería de sentido sin el concepto de fuerza, pero transmite un significado preciso para el concepto de "fuerza neta nula". Esta tendencia de un cuerpo a permanecer en su estado inicial de movimiento (o en reposo) se denomina inercia. Hay que tener en cuenta que, según la primera ley, lo único que importa es la fuerza resultante. Es irrelevante que se apliquen simultáneamente dos o tres fuerzas (o cualquier número): si se anulan entre sí, su efecto (o la ausencia de efecto) es el mismo que el de no aplicar ninguna fuerza al cuerpo. Entonces decimos que el cuerpo está en equilibrio.

La Segunda Ley es muy explícita: La fuerza es la tasa de cambio temporal del momento

$$\mathbf{p} \equiv m\mathbf{v}, \quad (1.1)$$

con m la masa, y \mathbf{v} la velocidad del cuerpo. Por lo tanto, reescribimos la Segunda Ley como

$$\mathbf{F}_{\text{net}} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad (1.2)$$

$$= \frac{d}{dt}(m\mathbf{v}), \quad (1.3)$$

En el caso de una masa constante, podemos escribir

$$\mathbf{F}_{\text{net}} = m \frac{d}{dt}(\mathbf{v}) \equiv m\mathbf{a} \quad (1.4)$$

1.2 Electromagnetismo

Otro éxito espectacular de la física clásica es el descubrimiento de las leyes que explican el comportamiento de las partículas y corrientes cargadas, y sus campos eléctricos y magnéticos asociados. Esto lo consiguieron varios científicos a partir del siglo XVIII y culminó con el trabajo seminal de James Clerk Maxwell (1831-1879). Las leyes que definen el electromagnetismo pueden resumirse sucintamente con las llamadas ecuaciones

de Maxwell

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (1.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.6)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.7)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \quad (1.8)$$

Con \mathbf{E} el campo eléctrico, \mathbf{B} el campo magnético, ρ la densidad de carga eléctrica y \mathbf{J} la densidad de corriente. ε_0 es la permitividad del vacío y μ_0 la permeabilidad del vacío.

$$\varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1} \quad (1.9)$$

$$\mu_0 = 1.2566 \times 10^{-6} \text{ N} \cdot \text{A}^{-2} \quad (1.10)$$

$$\mu_0 \varepsilon_0 = \frac{1}{c^2} \quad (1.11)$$

con F el faradio o farad, N el newton $N = kg \cdot m \cdot s^{-2}$ y A el amperio o ampere. Estas ecuaciones deben complementarse con la Fuerza de Lorentz (Hendrik Antoon Lorentz 1853-1928) que describe la dinámica de una partícula de carga q interactuando con el campo electromagnético

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (1.12)$$

Recordemos las fórmulas del operador ∇ , $\nabla \cdot \mathbf{E}$ se denomina divergencia mientras que $\nabla \times \mathbf{E}$ se conoce como rotacional. El operador ∇ se escribe en forma cartesiana como un vector tridimensional

$$\nabla = \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \equiv \vec{e}_x \partial_x + \vec{e}_y \partial_y + \vec{e}_z \partial_z \quad (1.13)$$

donde se ha usado la notación

$$\partial_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}, \quad \partial_y \equiv \frac{\partial}{\partial y}, \quad \partial_z \equiv \frac{\partial}{\partial z}, \quad (1.14)$$

y los vectores \vec{e}_x , \vec{e}_y y \vec{e}_z son los vectores unitarios en las direcciones x, y, z . Como la divergencia se escribe como un producto escalar entre el operador nabla ∇ y un vector \mathbf{E} , obtenemos

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} \equiv \partial_x E_x + \partial_y E_y + \partial_z E_z \quad (1.15)$$

con

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

De la misma forma, usando el producto vectorial obtenemos el rotacional

$$\nabla \times \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \partial_y E_z - \partial_z E_y \\ \partial_z E_x - \partial_x E_z \\ \partial_x E_y - \partial_y E_x \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

Si nos concentramos en el vacío, es decir sin fuentes eléctrica $\rho = 0$ y corriente \mathbf{J} , las ecuaciones de Maxwell son

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (1.18)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.19)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.20)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.21)$$

Tomando el rotacional de la tercera ecuación, obtenemos

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \nabla \times \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.22)$$

$$= -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (1.23)$$

donde se ha usado la ec.(1.21). Usaremos una identidad que se puede verificar por calculo directo

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E} \quad (1.24)$$

donde Δ se llama el laplaciano y corresponde a $\nabla \cdot \nabla$, es decir

$$\Delta \mathbf{E} = \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial z^2} \quad (1.25)$$

Usando esta identidad, encontramos

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (1.26)$$

y finalmente con la ayuda de la ec.(1.18) obtenemos

$$\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.27)$$

lo que corresponde a la ecuación de ondas, es decir una ecuación que describe una onda que se propaga a la velocidad c . De forma totalmente similar, podemos hacer el calculo para el campo \mathbf{B} y encontrar

$$\Delta \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.28)$$

Es decir que el campo eléctrico y el campo magnético se propagan al mismo tiempo, y a la misma velocidad. Forman la onda electromagnética. Estas ondas propagan una energía que es proporcional al cuadrado del campo, es decir

$$\frac{1}{2} \varepsilon_0 |\mathbf{E}|^2 + \frac{1}{2\mu_0} |\mathbf{B}|^2 \quad (1.29)$$

Podemos buscar una solución, conocida como ondas planas, y expresada matemáticamente como:

$$\mathbf{E}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (1.30)$$

$$\mathbf{B}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{B}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (1.31)$$

donde \mathbf{E}_0 y \mathbf{B}_0 son los vectores de amplitud constante de los campos eléctrico y magnético, respectivamente, \mathbf{r} es el vector de posición, ω es la frecuencia angular que se relaciona con la periodicidad de la onda a través de $\omega = 2\pi/T$, t es la variable tiempo y \mathbf{k} es el vector de onda, que se define como una cantidad vectorial cuya magnitud está relacionada con la longitud de onda λ de la onda y cuya dirección indica el sentido de propagación de la onda. En concreto, la magnitud de \mathbf{k} viene dada por

$$|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Así, \mathbf{k} tiene unidades de longitud recíproca y apunta en la dirección en la que viaja la onda. Sustituyendo esto en las ecuaciones de onda se confirma que $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 = 0$ y $\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_0 = 0$, lo que indica que tanto \mathbf{E} como \mathbf{B} son perpendiculares a la dirección de propagación (a lo largo de \mathbf{k}).

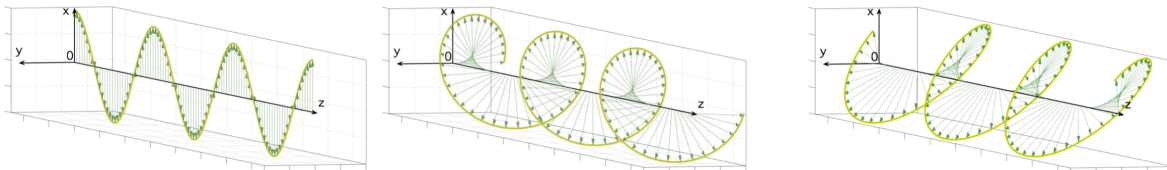
Además, a partir de la Ley de Faraday (1.20), se puede demostrar que $\mathbf{k} \times \mathbf{E}_0 = \omega \mathbf{B}_0$, lo que implica que \mathbf{B}_0 es perpendicular a \mathbf{E}_0 .

Así, los campos eléctrico y magnético \mathbf{E} y \mathbf{B} son ortogonales entre sí y a la dirección de propagación \mathbf{k} , formando un sistema ortogonal de vectores que se propaga por el espacio.



Para caracterizar mejor la onda electromagnética, podemos considerar también la polarización, que se refiere a la dirección del campo eléctrico \mathbf{E} en una onda electromagnética. Mientras que \mathbf{k} indica la dirección de propagación de la onda, la polarización describe cómo oscila el campo eléctrico en el plano perpendicular a \mathbf{k} . Existen 3 tipos de polarización¹:

- Polarización lineal: El campo eléctrico oscila en una única dirección perpendicular a \mathbf{k} .
- Polarización circular: El campo eléctrico gira de forma circular a medida que la onda se propaga. Puede ser de izquierdas o de derechas en función del sentido de rotación..
- Polarización elíptica: El campo eléctrico traza una elipse a lo largo del tiempo. Es una forma general de polarización que incluye tanto la lineal como la circular como casos especiales.



1.3 Física estadística

La termodinámica se estableció principalmente como una ciencia empírica que se ocupaba de cantidades específicas pertenecientes a un sistema dado. Estas magnitudes, que se utilizan para especificar el estado (físico o termodinámico) del sistema, pueden ser de naturaleza mecánica (por ejemplo, la presión, el volumen y el trabajo), mientras que otras son más sutiles y necesitaron las aportaciones de varios científicos antes de llegar a una buena comprensión (por ejemplo, la temperatura, el calor y la entropía).

¹En realidad, tenemos 2 polarizaciones lineales ortogonales que permiten construir las polarizaciones circulares e elípticas

Por otro lado, tenemos la interpretación estadística de la termodinámica, a través de la mecánica estadística (o física estadística), fue establecida en la segunda mitad del siglo XIX por Maxwell, Ludwig Eduard Boltzmann (1844-1906), y J. Willard Gibbs (1839-1903). Esta teoría nos acerca al mundo de la Física Moderna que llegaría a principios del siglo XX, ya que se basa en la teoría atómica de la materia. Aunque los átomos y las moléculas aún no se comprendían bien en aquella época (para eso habría que esperar a la llegada de la Mecánica Cuántica), la interpretación estadística de estos constituyentes de la materia permitiría calcular importantes magnitudes y relaciones físicas.

La física estadística describe el comportamiento macroscópico de sistemas a partir de sus propiedades microscópicas. Uno de los conceptos centrales en la física estadística es la distribución de probabilidad, que permite predecir la probabilidad de encontrar un sistema en un determinado estado energético.

1.3.1 Teorema de equipartición

Consideremos una partícula de gas con masa m que se mueve con componentes de velocidad v_x, v_y y v_z . Cuando esta partícula choca elásticamente con una pared perpendicular a la dirección x , ejerce una fuerza sobre la pared debida al cambio de momento. La fuerza puede expresarse de la siguiente manera

$$\text{Fuerza por partícula} = \frac{\Delta p_x}{\text{Tiempo entre colisiones}} \quad \left(F = \frac{\Delta p}{\Delta t} \right)$$

Para una partícula que se mueve con velocidad v_x en la dirección x , el cambio de momento cuando choca contra la pared es $\Delta p_x = mv_x - (-mv_x) = 2mv_x$.

El tiempo entre colisiones² es $2L/v_x$. Por lo tanto, la fuerza sobre la pared es

$$\text{Fuerza por partícula} = \frac{2mv_x}{2L/v_x} = \frac{mv_x^2}{L} \quad (1.32)$$

Sumando las contribuciones de fuerza de todas las partículas, encontremos

$$F_x = \sum_{i=1}^N \frac{mv_{x,i}^2}{L} \quad (1.33)$$

Y tomando la media

$$\langle F_x \rangle = \frac{Nm \langle v_x^2 \rangle}{L} \quad (1.34)$$

²Después de que la partícula golpea la pared, viajará una distancia L para llegar a la pared opuesta y luego otra distancia L para volver a la pared original

La presión P se define como la fuerza por unidad de superficie, y la superficie A de la pared está relacionada con el volumen $V = AL$ del recipiente. Así que la presión P es

$$P = \frac{F_x}{A} = \frac{Nm\langle v_x^2 \rangle}{AL} \quad (1.35)$$

Podemos introducir la densidad del gas $\rho = \frac{Nm}{V}$, lo que da

$$P = \rho \langle v_x^2 \rangle \quad (1.36)$$

En tres dimensiones, las componentes de la velocidad v_x, v_y y v_z son independientes y tienen la misma distribución. Para un gas isótropo, la energía cinética media se distribuye por igual entre las tres direcciones

$$\langle v^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle \quad (1.37)$$

ya que $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle$, obtenemos

$$\langle v^2 \rangle = 3 \langle v_x^2 \rangle \quad (1.38)$$

Así

$$\langle v_x^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle \quad (1.39)$$

lo que nos permite obtener

$$P = \frac{1}{3} \rho \langle v^2 \rangle \quad (1.40)$$

De la ley de los gases ideales, tenemos

$$PV = nRT = Nk_B T \quad (1.41)$$

Lo que implica

$$\frac{1}{3} \rho \langle v^2 \rangle V = Nk_B T \quad (1.42)$$

$$\frac{1}{3} Nm \langle v^2 \rangle = Nk_B T \quad (1.43)$$

$$m \langle v^2 \rangle = 3k_B T \quad (1.44)$$

Lo que da

$$\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T \quad (1.45)$$

Es un resultado de la teoría cinética de los gases, que se puede obtener en física estadística y que se llama el teorema de equipartición.

1.3.2 Distribución de Maxwell-Boltzmann

Maxwell en 1860 consideró la forma de la función de distribución de probabilidad $P(v_x, v_y, v_z)$ para las componentes x, y , y z de la velocidad de cualquier molécula en un gas en equilibrio. La función de distribución de probabilidad se define de modo que la probabilidad de que estas componentes estén respectivamente entre v_x y $v_x + dv_x$, entre v_y y $v_y + dv_y$, y entre v_z y $v_z + dv_z$, es de la forma

$$P(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z \quad (1.46)$$

Supuso (sin ofrecer una justificación real) que la probabilidad de que cualquier componente de la velocidad de una partícula se encuentre en un intervalo determinado no está correlacionada con las demás componentes de la velocidad. Entonces $P(v_x, v_y, v_z)$ debe tomar la forma de un producto:

$$P(v_x, v_y, v_z) = f(v_x) g(v_y) h(v_z) \quad (1.47)$$

La simetría rotacional exige además que P sólo pueda depender de la magnitud de la velocidad, no de su dirección, y por tanto sólo de $v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$. La única función de $v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ que tiene la forma $f(v_x) g(v_y) h(v_z)$ es proporcional a una exponencial:

$$P(v_x, v_y, v_z) \propto \exp(-C(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)) \quad (1.48)$$

La constante C debe ser positiva para que P no explote para velocidades grandes, lo que haría imposible establecer la probabilidad total igual a la unidad, como debe ser. Tomando C positivo, y fijando la probabilidad total (la integral de P sobre todas las velocidades) para cada partícula igual a uno, se obtiene el factor de proporcionalidad:

$$P(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{C}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-C(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)) \quad (1.49)$$

Podemos usar esto para calcular los componentes de la velocidad cuadrática media

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \int v_x^2 P(v_x, v_y, v_z) = \frac{1}{2C} \quad (1.50)$$

Pero como sabemos del teorema de equipartición que

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = k_B T / m \quad (1.51)$$

lo que implica $C = m/2k_B T$ y la distribución de Maxwell toma la forma

$$P(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp(-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/2k_B T) \quad (1.52)$$

Lo que podemos escribir como

$$P = \alpha e^{-E/k_B T} \quad (1.53)$$

donde α es un coeficiente de normalización y E la energía, en este caso, la energía cinética.

1.4 Los fundamentos de la física

Esta física del siglo XIX se basan en varias hipótesis:

- Existencia de un espacio absoluto y un tiempo absoluto, es decir que las partículas, ondas... viven en un espacio fijo, independiente de su existencia y un tiempo absoluto; igual para todos.
- Determinismo: un sistema está totalmente determinado por un número finito de parámetros, por ejemplo la posición, velocidad... , reflejado en la palabra famosa de Laplace respondiendo a Napoleón

Sieur, nunca he necesitado esa hipótesis

- Los valores pueden ser determinados con precisión arbitraria. No hay límite intrínseco. Solo existen errores de medición o del instrumento.
- La evolución de un sistema en el tiempo es completamente determinada por su estado anterior y las leyes fundamentales (es decir ecuaciones diferenciales).

Este sistema funcionó muy bien. Por ejemplo, Lord Kelvin dijo en el año 1900

Ahora no queda nada nuevo que descubrir en la física, todo lo que queda es la medición cada vez más precisa.... existen 2 pequeños problemas: la experiencia de Michelson y Morley y el cuerpo negro, pero van a ser resueltos rápidamente

Lord Kelvin estaba tan equivocado que citó los 2 experimentos que revolucionarían el siglo XX, el experimento de Michelson y Morley nos lleva a la relatividad y el cuerpo negro a la mecánica cuántica.

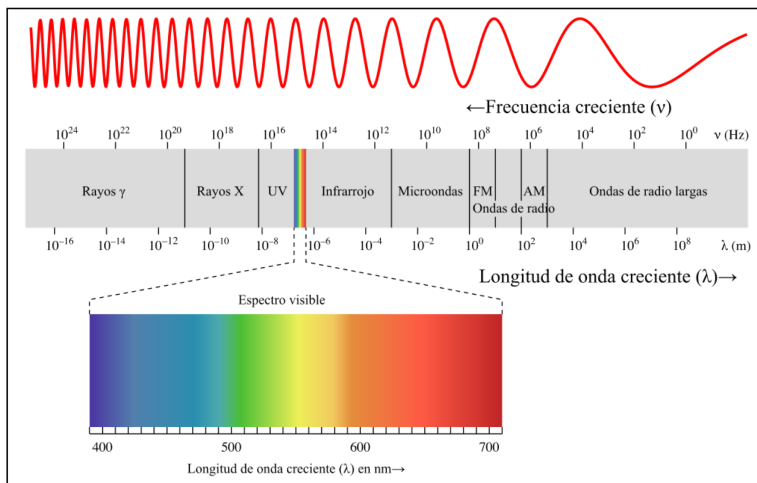
2. Las bases experimentales de la física cuántica

Durante las últimas décadas del siglo XIX los científicos descubrieron fenómenos que no podían explicarse.

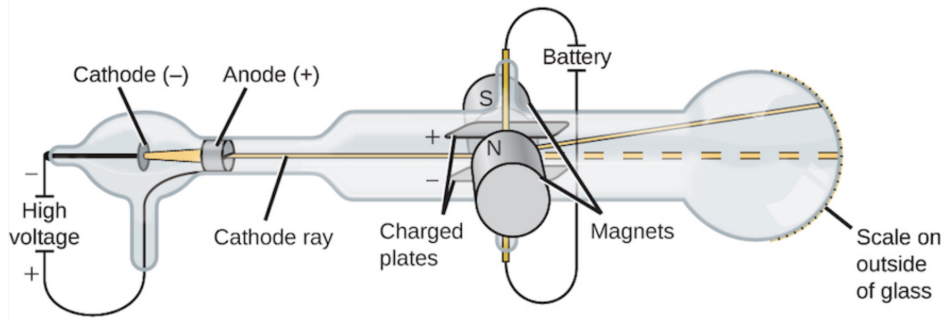
2.1 Descubrimiento de los rayos X y el electrón

Tras la invención en 1654 de la bomba de vacío por Otto von Guericke, los físicos empezaron a experimentar con el paso de electricidad de alta tensión a través de aire enrarecido. En la década de 1890, los científicos estaban familiarizados con este dispositivo, aunque no comprendieran el origen y la constitución de los rayos catódicos. El concepto de una subestructura atómica de la materia estaba ampliamente aceptado debido a su uso para explicar los resultados de los experimentos químicos. Por lo tanto, se suponía que los rayos catódicos tenían algo que ver con los átomos. Se sabía que emanaban de placas metálicas colocadas dentro de cavidades de vidrio evacuadas (es decir, se creaba el vacío dentro de un tubo de vidrio) cuando estas placas se sometían a un alto potencial eléctrico.

En 1895, el físico Wilhelm Röntgen (1845-1923) descubrió que estos rayos catódicos eran responsables de la emisión de radiación secundaria al bombardear las paredes del tubo de vidrio. Röntgen denominó a esta radiación rayos X , que demostró que no se veían afectados por campos magnéticos en su trayectoria (es decir, no tenían carga eléctrica). También demostró que estos rayos eran muy penetrantes, ya que incluso podía obtener imágenes de los huesos cuando se permitía que los rayos X atravesaran el cuerpo humano. Ahora sabemos que los rayos X forman parte del espectro electromagnético



Un par de años más tarde, J. J. Thompson (1856-1940) consiguió demostrar que los rayos catódicos eran partículas cargadas negativamente. Para ello, sometió los rayos catódicos a campos eléctricos y magnéticos en un intervalo espacial finito y estudió su comportamiento dinámico midiendo el desplazamiento que adquirirían en esas circunstancias.



Para ello, consideramos la fuerza de Lorentz que actúa sobre los rayos, que suponemos de carga q

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (2.1)$$

Ahora supondremos que

$$\mathbf{E} = E\mathbf{e}_y \quad (2.2)$$

$$\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z \quad (2.3)$$

En primer lugar, Thompson apagó el campo magnético y según la ecuación (2.1) obtuvo

$$F_y = ma_y \quad (2.4)$$

$$= qE \quad (2.5)$$

Sin embargo, considerando que para placas eléctricas de longitud ℓ el tiempo de interacción entre la carga y el campo eléctrico es $t \approx \ell/v_x$ tenemos para la desviación angular total (es decir, el ángulo en la trayectoria del rayo al salir de las placas)

$$\tan(\theta) = \frac{v_y}{v_x} = \frac{a_y t}{v_x} \quad (2.6)$$

$$\approx \frac{qE \ell}{m v_x^2} \quad (2.7)$$

El único parámetro desconocido en esta ecuación es la velocidad, sobre la que también podemos obtener un control ya que está incluida de la parte magnética de la fuerza de

Lorentz. Esto se consigue ajustando la intensidad del campo magnético de forma que la fuerza neta sobre el rayo se anule (es decir, de forma que $\theta = 0$). Es decir

$$F_y = q(E - v_x B) = 0 \quad (2.8)$$

lo que nos da

$$E = v_x B \quad (2.9)$$

La velocidad se determina entonces cuando se conocen las intensidades de los campos eléctrico y magnético. Insertando la ecuación (2.9) en (2.6) obtenemos

$$\frac{q}{m} = \frac{E \tan(\theta)}{B^2 \ell} \quad (2.10)$$

y la relación entre la carga y la masa de un rayo catódico puede medirse experimentalmente a través del ángulo de desviación. En su experimento original Thompson obtuvo un valor 35% inferior al valor aceptado de $1,76 \cdot 10^{11} \text{C} \cdot \text{kg}^{-1}$. La partícula de rayos catódicos acabó llamándose electrón.

La carga del electrón fue finalmente medida con gran precisión por Robert A. Millikan (1868-1953) con un experimento que utilizaba gotas de aceite cargadas. La idea básica se basa en el hecho de que las gotas de aceite pueden adquirir una carga eléctrica al caer de una boquilla metálica. Sometiendo las gotas a un campo eléctrico que ejercía una fuerza ascendente sobre ellas, Millikan pudo equilibrar la acción de la gravedad de forma que

$$qE = mg \quad (2.11)$$

o

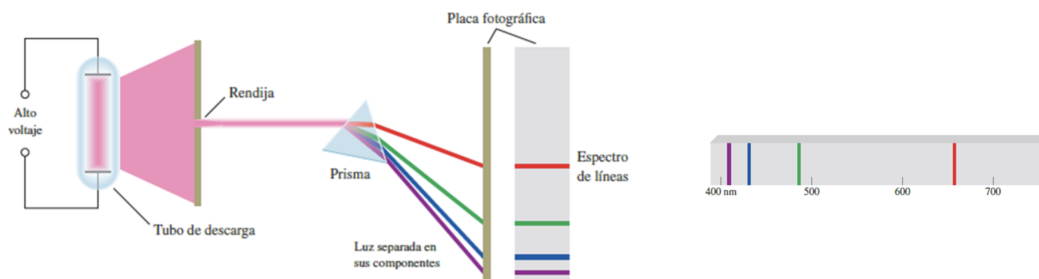
$$q = \frac{mg}{E} \quad (2.12)$$

donde m es la masa de una gota y g es la aceleración gravitatoria. La masa m también podía medirse apagando el campo eléctrico y midiendo la velocidad terminal de la gota. Millikan pudo demostrar entonces que la carga de una gota de aceite era siempre un múltiplo de un cuanto de carga elemental, que él determinó muy cercano al valor aceptado de $1,602 \cdot 10^{-19} \text{C}$ para el electrón.

2.2 Espectros de línea y ecuación de Rydberg

La aparición de las rejillas de difracción permitió desarrollar espectrómetros precisos, que a su vez estimularon el estudio de las líneas espectrales emitidas por distintas

sustancias químicas. Se comprendió que los espectros actuaban como una especie de huellas dactilares y podían utilizarse, no sólo para caracterizar elementos químicos, sino quizá también para conocer mejor la estructura de los átomos.



En la figura se muestra un ejemplo esquemático de un espectrómetro con rejilla. La radiación de un gas contenido en un tubo de descarga pasa a través de una rendija para colimarse en un haz, que luego incide en una rejilla de difracción. A continuación, la radiación se detecta en una pantalla situada lejos de la rejilla. Una de las características más destacadas de los espectros detectados era el hecho de que la radiación sólo se producía en un conjunto bien definido de longitudes de onda, es decir, no había radiación continua. Esto implicaba que los cambios de energía en los átomos que deben acompañar a la emisión de radiación (a través de la conservación de la energía) estaban cuantizados en niveles discretos. Por ejemplo, en 1885 Johann Balmer (1825-1898) obtuvo una fórmula empírica sencilla para hacer corresponder varias líneas del espectro del hidrógeno (las llamadas líneas de Balmer). Esta fórmula fue posteriormente generalizada por Johannes Rydberg (1854-1919), en 1890, con la llamada ecuación de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (2.13)$$

donde $R_H = 1.096776 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ es la constante de Rydberg, n es un número entero que define una serie de líneas espectrales dada, y $k > n$ es otro número entero que especifica una línea de la serie. Las series para $n = 1, 2, 3, 4$ y 5 son las series de Lyman, Balmer, Paschen, Brackett y Pfund del átomo de hidrógeno, respectivamente.

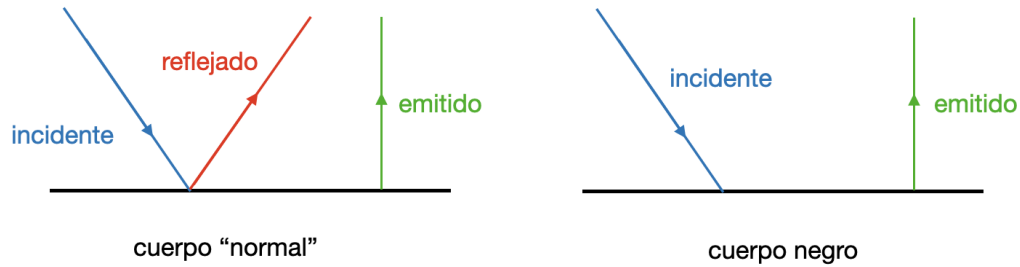
2.3 El cuerpo negro

El color de un metal cambia con la temperatura. Por ejemplo a los 800 grados, es rojo y a los 3000 grados es amarillo o blanco. La temperatura explica los diferentes colores de una estrella. Es la radiación térmica. Este fenómeno viene del movimiento de las cargas negativas (electrones) en el metal. De hecho, cualquier carga en movimiento

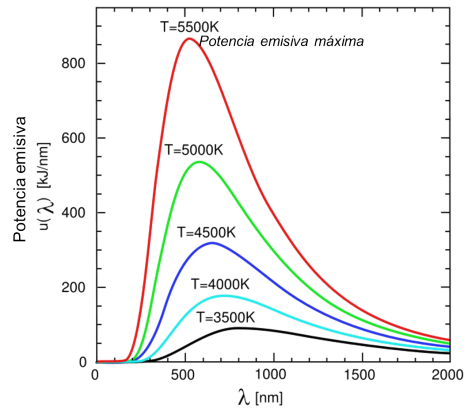
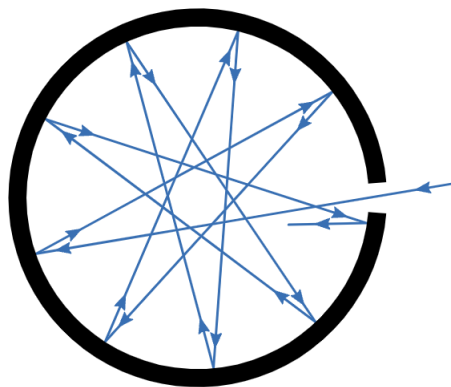
acelerado emite ondas electromagnéticas a una frecuencia proporcional al movimiento. Son estas ondas electromagnéticas que llamamos radiación y que podemos ver si su frecuencia es dentro del visible (400 nm – 800 nm). Un objeto rojo no emite solamente el rojo pero todas las frecuencias. Es el espectro de emisión. Solo ocurre que el rojo es dominante pero hay más frecuencias.

Todos los objetos calientes emiten radiación. Por ejemplo, a temperatura ambiente, la mayor parte se encuentra en el infrarrojo.

Hay en realidad varias radiaciones, podemos tener una radiación incidente que se refleja sobre el objeto, y define su color y la radiación térmica que depende de la temperatura. Un cuerpo negro es un cuerpo que absorbe toda la luz incidente pero como tiene una temperatura, emite una radiación: es la radiación de cuerpo negro.



En el laboratorio, podemos construir un objeto muy cercano al comportamiento del cuerpo negro, es una cavidad aislada. Con una cavidad de pequeña abertura, la energía radiante incidente a través de la abertura es absorbida por las paredes en múltiples reflexiones y solamente una mínima proporción escapa a través de la abertura.



Vemos en la parte izquierda de la figura una representación de la cavidad de un cuerpo negro mientras que en la parte derecha podemos ver el espectro emitido para

diferentes temperaturas del cuerpo negro. El espectro es continuo. Este resultado fue experimental. En la naturaleza, varios cuerpos son cercanos a un cuerpo negro, como por ejemplo la radiación emitida por una estrella, o la hipotética radiación de Hawking o la radiación cósmica de fondo que es una de las pruebas más importante de la teoría del big bang ...

2.4 Ley de Rayleigh-Jeans

Lord Rayleigh intentó explicar el espectro del cuerpo negro utilizando todo lo que se sabía en su época. Su planteamiento consistió en considerar una cavidad rectangular (utilizaremos una cavidad cúbica de lado L , para simplificar) y suponer que la cavidad contenía radiación electromagnética en forma de todos los modos normales posibles. Supuso además que, de acuerdo con el teorema de equipartición (1.45) cada uno de estos modos normales contendría una energía media $k_B T$, es decir, el doble de $k_B T/2$, ya que cada uno corresponde a una onda estacionaria formada por dos ondas que se propagan en sentido contrario, con k_B la constante de Boltzmann. Esto le permitió calcular la densidad de energía dentro de la cavidad y, por tanto, la cantidad que escaparía a través de un pequeño agujero de área A . El resultado, que derivaremos aquí, es la llamada ley de Rayleigh-Jeans.

En una cavidad de tamaño ($L \times L \times L$), el campo electromagnético es solución de la ec.(2.9)

$$\partial_x^2 E + \partial_y^2 E + \partial_z^2 E - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 E = 0 \quad (2.14)$$

con las condiciones de borde $E(0) = E(L) = 0$, es decir que el campo eléctrico es nulo sobre las paredes. Si tenemos $E(0) \neq 0$ y $E(L) \neq 0$ tendríamos un campo eléctrico sobre las paredes es decir una disipación de energía. Pero queremos llegar a un equilibrio, es decir a una situación estacionaria por lo tanto sin perdida de energía. La solución de la ecuación con estas condiciones es de la forma

$$E = E_0 \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi ct}{\lambda}\right) \quad (2.15)$$

con n_x, n_y, n_z enteros positivos. Cada valores de este conjunto de parámetros define una solución diferente. Por lo tanto cada conjunto de parámetros definen una onda con una frecuencia particular, llamada modo normal.

Substituyendo en la ecuación, obtenemos una restricción

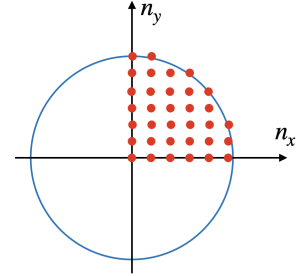
$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{4L^2}{\lambda^2} \quad (2.16)$$

Por lo tanto si definimos una longitud de onda referente λ_0 y preguntamos cuantas soluciones existen por longitudes de onda $\lambda > \lambda_0$. La respuesta es el numero de conjuntos (n_x, n_y, n_z) tal que

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 < \frac{4L^2}{\lambda_0^2} \quad (2.17)$$

Para simplificar, la intuición, podemos estudiar el caso en dos dimensiones. Como tenemos muchos puntos, el numero de puntos corresponde al área de la región, es decir un cuarto de un disco

$$\frac{1}{4}\pi \left(\frac{2L}{\lambda_0}\right)^2$$



Generalizando este resultado a tres dimensiones, obtenemos

$$\frac{1}{8}\frac{4}{3}\pi \left(\frac{2L}{\lambda_0}\right)^3 \times 2 \quad (2.18)$$

con un factor 2 adicional ya que tenemos por cada modos dos soluciones que representan dos polarizaciones diferentes. Son dos polarizaciones lineales en direcciones ortogonales a partir de las cuales podemos construir por superposición, polarizaciones circulares o elípticas. En conclusión el numero, n , de modos es

$$n = \frac{8\pi L^3}{3\lambda_0^3} \Rightarrow dn = \frac{8\pi L^3}{\lambda_0^4} d\lambda_0 \quad (2.19)$$

Lo que implica que tenemos $8\pi/\lambda_0^4$ modos por unidad de volumen por longitud de onda entre λ_0 y $\lambda_0 + d\lambda_0$ o de forma equivalente, el numero de modos por unidad de volumen por longitud de onda entre las longitudes de onda λ y $\lambda + d\lambda$ es

$$\frac{8\pi}{\lambda^4} \quad (2.20)$$

Como lo hemos visto, cada modo tiene una energía media $k_B T$, lo que nos permite concluir que la energía por unidad de volumen es

$$du = \frac{8\pi}{\lambda^4} k_B T d\lambda \quad (2.21)$$

o la energía por unidad de volumen y por unidad de longitud de onda

$$\frac{du}{d\lambda} = \frac{8\pi}{\lambda^4} k_B T \quad (2.22)$$

Observamos que esta distribución es similar a las observaciones para grandes longitudes de onda pero que el resultado de Rayleigh-Jeans diverge cuando $\lambda \rightarrow 0$. Se llama la catástrofe ultravioleta.

En el año 1896, Wilhelm Wien, encontró un ajuste de la curva del cuerpo negro de la forma $\lambda^{-5}e^{-\alpha/\lambda T}$ con α una constante. Pero Max Planck encontró una mejor formula

$$\frac{\lambda^{-5}}{e^{1/\lambda T} - 1} \quad (2.23)$$

y trato de encontrar la teoría para obtener este resultado.

2.5 La solución de Planck

Para Planck, el teorema de equipartición no funciona. El 14 de diciembre del año 1900, hizo la hipótesis que la energía de la radiación en cada uno de los modos normales enumerados por Rayleigh sólo podía tomar ciertos valores discretos dados por

$$E_n = n\varepsilon \quad (2.24)$$

donde n es un número entero y ε un parametro desconocido. Por tanto, hay que abandonar la equipartición de la energía, donde se supone que cada modo contiene una energía media de $k_B T$. Además, tomando prestada la distribución clásica de Maxwell-Boltzmann, supuso que la probabilidad de que se realice un modo de energía E_n es (1.53)

$$P_n = \alpha e^{-E_n/k_B T}, \quad (2.25)$$

con α una constante. De ello se deduce que la energía media de un cuerpo negro es

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n E_n e^{-E_n/k_B T}}{\sum_n e^{-E_n/k_B T}} = \varepsilon \frac{\sum_n n e^{-n\varepsilon/k_B T}}{\sum_n e^{-n\varepsilon/k_B T}} = \varepsilon \frac{\sum_n n e^{-nx}}{\sum_n e^{-nx}} \quad (2.26)$$

donde hemos definido $x = \varepsilon/k_B T$. Pero sabemos que

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-x})^n = \frac{1}{1 - e^{-x}} \quad (2.27)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx} = -\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = -\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{1 - e^{-x}} \right) = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} \quad (2.28)$$

lo que implica

$$\langle E \rangle = \frac{\varepsilon e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{\varepsilon}{e^{-x} - 1} = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/k_B T} - 1} \quad (2.29)$$

Por lo tanto, la energía emitida por unidad de longitud de onda y por unidad de volumen es

$$\frac{du}{d\lambda} = \frac{8\pi}{\lambda^4} \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/k_B T} - 1} \quad (2.30)$$

Ajustando esta expresión con las observaciones, Planck hizo la hipótesis que

$$\varepsilon = \frac{hc}{\lambda} = h\nu \quad (2.31)$$

con h una nueva constante llamada constante de Planck.

$$\frac{du}{d\lambda} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1} \quad (2.32)$$

con $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J s.

La energía total emitida es

$$u = \int_0^\infty du = 8\pi hc \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda k_B T} - 1)} \quad (2.33)$$

$$= \frac{8\pi h}{15c^3} \left(\frac{\pi k_B T}{h} \right)^4 \quad (2.34)$$

Fue conocido experimentalmente como la ley de Stefan-Boltzmann

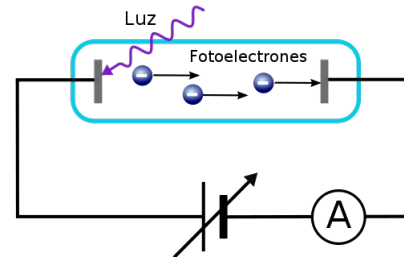
$$u = \sigma T^4 \quad (2.35)$$

con σ la constante de Stefan-Boltzmann, $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8}$ Wm⁻² K⁻⁴ lo que implica $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$ Js.

2.6 El efecto fotoeléctrico

Cuando dedujo su ley de la radiación del cuerpo negro, Planck no tenía ninguna explicación para justificar su suposición de energías discretas. Pero él (como muchos otros) consideraba que el problema de la radiación del cuerpo negro era tan importante que había que encontrar una explicación "costase lo que costase". Supuso que con el tiempo se encontraría una explicación mejor que la física "clásica". Sin embargo, esto nunca ocurrió. En cambio, Einstein se dio cuenta de la importancia de esta suposición y la empleó para resolver otro problema pendiente de la física: la explicación del efecto fotoeléctrico.

A principios del siglo XX se sabía que cuando la luz visible o ultravioleta incidía sobre un metal, los electrones (es decir, los fotoelectrones) eran expulsados de la superficie. Los fotoelectrones salen de un cátodo y se reúnen en una placa colectora; entre estas dos placas puede aplicarse una diferencia de tensión. La corriente eléctrica debida a estos fotoelectrones puede medirse con un medidor de amperio, como se muestra en la figura. En aquella época se conocían resultados experimentales gracias al trabajo de Heinrich Hertz. Los resultados esperados eran



- Una intensidad de la corriente proporcional a la intensidad de la radiación.
- Los electrones deberían acumular la energía de la onda, hasta que tengan suficiente energía (W). Por lo tanto necesitamos un tiempo antes de tener una corriente en el sistema, un retraso temporal.

Pero los resultados experimentales muestran algo bien diferente

- La intensidad de la corriente crece no con la intensidad de la luz pero con su frecuencia.
- No hay retraso temporal
- Existe una frecuencia crítica ν_c . Solo si $\nu > \nu_c$ hay una corriente.

A partir de la ley de Planck, Einstein sugirió³ en el año 1905 que la luz son partículas (fotones) de energía $E = h\nu$. La energía que un electrón absorbe de una radiación electromagnética de frecuencia ν es $E = h\nu$. La energía cinética del electrón emitido es

$$E_c = h\nu - W \quad (2.36)$$

con W la energía mínima necesaria para retirar un electrón de la superficie del material. Se denomina función de trabajo de la superficie y depende obviamente del metal. Como E_c debe ser positivo obtenemos que $\nu > W/h$ y por lo tanto existe una frecuencia crítica definida como $\nu_c = W/h$. Cuando $\nu > \nu_c$, un electrón absorbe todo el fotón y escapa, es decir que no hay retraso temporal. En caso contrario, si $\nu < \nu_c$, el electrón no tiene suficiente energía y por lo tanto no escapa.

³Trabajo por lo cual ha recibido el premio Nobel

Por otro lado, usando las ecuaciones de Maxwell, la relación entre energía y momento es $E = pc$. Pero el mismo año, Einstein mostró que según la teoría de la relatividad especial

$$E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2 \quad (2.37)$$

donde m es la masa en reposo. Por lo tanto, si por el fotón tenemos $E = pc$, la masa del fotón debe ser nula. Aunque no tiene masa, tiene energía

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} \quad (2.38)$$

Podemos obtener el momento del foton

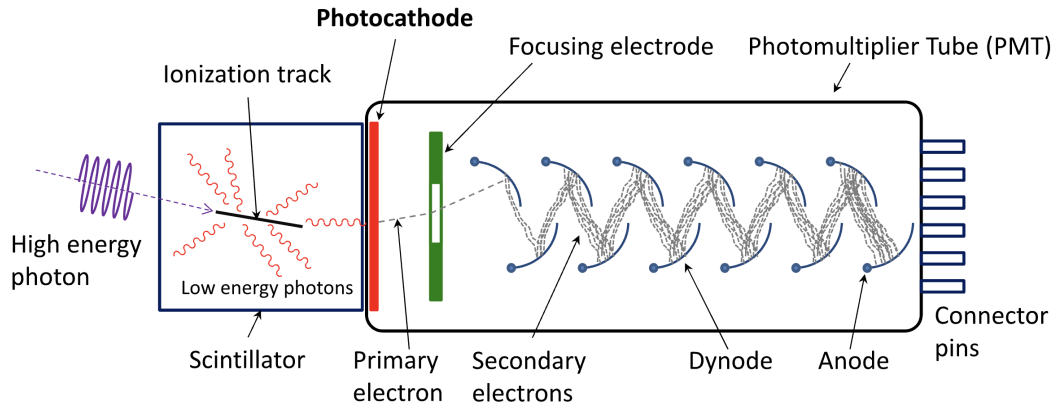
$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} \equiv \hbar k \quad (2.39)$$

con $\hbar = h/2\pi$ la constante de Planck reducida y $k = 2\pi/\lambda$ la longitud de onda.

El efecto fotoeléctrico tiene varias aplicaciones. Por ejemplo en la luna hay polvo lunar que está compuesto por partículas formadas por impactos de micrometeoritos y por el viento solar. Estas partículas pueden cargarse eléctricamente debido a su exposición a la luz solar, que incluye la radiación ultravioleta. Cuando la luz ultravioleta del Sol incide sobre la superficie lunar, puede provocar la emisión de electrones de las partículas de polvo. El efecto fotoeléctrico puede hacer que las partículas de polvo lunar se carguen positivamente. Como resultado, estas partículas pueden repelerse entre sí y quedar suspendidas sobre la superficie lunar en un fenómeno conocido como levitación electrostática. Este efecto provoca una "atmósfera de polvo" cerca de la superficie.

Como segundo ejemplo, podemos mencionar un tubo fotomultiplicador (PMT), que es un dispositivo utilizado para detectar y medir niveles bajos de luz. Amplifica la señal de los fotones entrantes, lo que lo hace útil en diversas aplicaciones como la espectroscopia, las imágenes médicas y la física experimental. El PMT tiene un cátodo fotoemisivo que suele estar recubierto de un material como el cesio, el antimonio o el arseniuro de galio. Cuando los fotones inciden sobre esta superficie, el efecto fotoeléctrico provoca la emisión de electrones. Una vez emitidos los electrones desde el cátodo, se aceleran hacia una serie de electrodos llamados dinodos. Cada dinodo se mantiene a una tensión progresivamente más alta. Cuando los electrones golpean un dinodo, se emiten más electrones debido a la emisión secundaria, lo que amplifica la señal. Los electrones pasan en cascada por varios dinodos, y cada etapa multiplica el número de electrones. Finalmente, llegan al ánodo, donde se recoge la carga acumulada y se convierte en una señal eléctrica. Esta señal es proporcional a la intensidad de la luz entrante. Se utilizan en una amplia gama de aplicaciones debido a su alta sensibilidad y

capacidad para detectar niveles muy bajos de luz. Por ejemplo, se utilizan en aparatos como los escáneres PET para detectar los rayos gamma emitidos por los radiotrazadores del cuerpo.



Por último, podemos mencionar la espectroscopia de fotoemisión, que es una técnica que aprovecha el efecto fotoeléctrico para estudiar la estructura electrónica de los materiales. Consiste en proyectar fotones sobre un material y analizar los electrones emitidos. Existen distintos tipos de PES, entre ellos

- Espectroscopia de fotoemisión ultravioleta (UPS): Utiliza luz ultravioleta para estudiar la estructura de la banda de valencia de los materiales.
- Espectroscopia de fotoelectrones de rayos X (XPS): Utiliza rayos X para investigar los estados electrónicos del núcleo y la composición química de los materiales.
- Espectroscopia de fotoemisión de ángulo resuelto (ARPES): Proporciona información detallada sobre la estructura de bandas y la superficie de Fermi midiendo el ángulo y la energía cinética de los electrones emitidos.

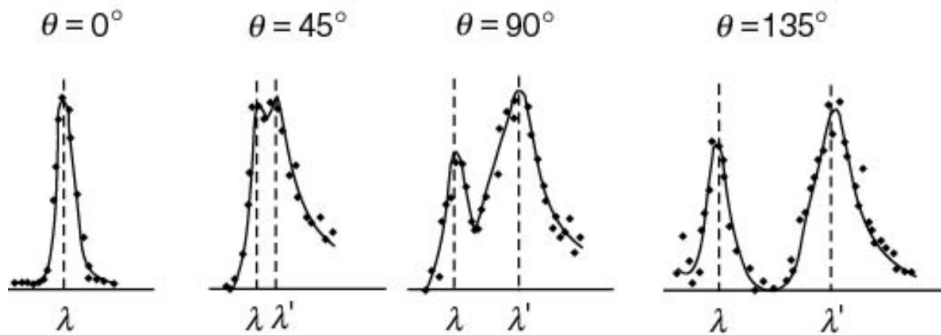
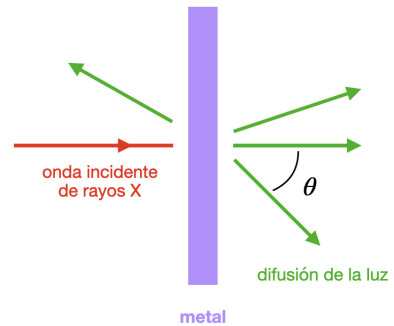
Cuando un fotón con suficiente energía incide sobre un material, puede excitar un electrón, provocando su emisión. Midiendo la energía cinética y el momento de estos electrones emitidos, podemos deducir información sobre la estructura electrónica y las propiedades del material, como las energías de enlace de los electrones en diferentes orbitales atómicos.

2.7 El efecto Compton

Otro hecho experimental que no podía explicar la física clásica es el estudiado por Arthur Compton (1892-1962) en 1923 sobre la dispersión de fotones por electrones ligados a átomos. Según la física clásica, un electrón ligado a un átomo puede, con

un buen nivel de aproximación, modelarse como si estuviera armónicamente ligado al núcleo (es decir, como "sujeto con un muelle"). La dispersión de la radiación electromagnética (es decir, de los fotones) consistiría en que el electrón oscilara armónicamente a la frecuencia de la radiación (a través del acoplamiento debido a la fuerza de Lorentz $q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$) y volviera a radiar (es decir, a dispersarse) a esa misma frecuencia debido a la aceleración provocada por sus oscilaciones. Este proceso se denomina dispersión de Thomson. Pero Compton observó que en la radiación dispersa había una componente de mayor longitud de onda (la onda modificada), además de la componente esperada en la longitud de onda incidente (la onda no modificada). Compton sólo pudo explicar este fenómeno utilizando el concepto de fotón de Einstein.

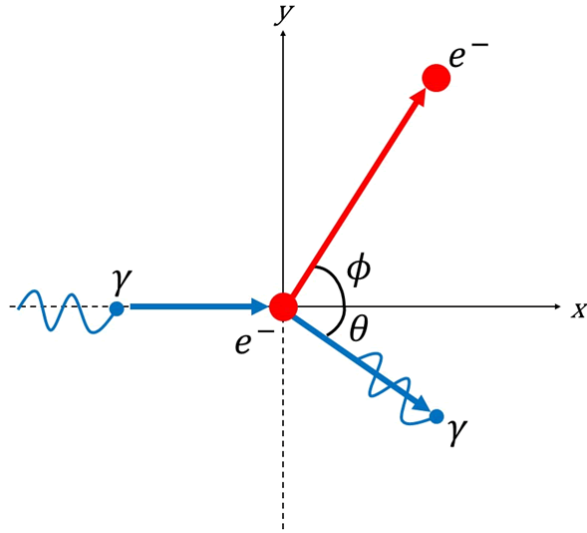
Se envía una onda incidente de rayos X con longitud de onda λ y se observa la onda saliente (la difusión). Se observa una intensidad, I , de la difusión según el ángulo θ . La onda emitida puede aparecer en cualquier dirección. Por lo tanto, ponemos un detector en un cierto ángulo y se observa la luz recibida. Obviamente no se recibe una sola frecuencia, hay un poco de dispersión en la longitud de onda. Pero se debería observar una distribución en la intensidad centrada en la longitud de onda incidente λ .



Según la interpretación clásica, los rayos X son una onda de longitud de onda (λ) o frecuencia $\nu = c/\lambda$. Cuando la onda pasa (es un campo eléctrico oscilante), los electrones comienzan a vibrar alrededor de sus órbitas con frecuencia ν . Eso implica la emisión de una onda electromagnética con frecuencia ν en todas las direcciones. Se entiende perfectamente la difusión pero no se entiende la aparición de una segunda longitud de onda λ' de tal manera que $\lambda' - \lambda$ crece con el ángulo de observación θ .

Tomando el punto de vista de que la luz está compuesta de fotones, tendremos la interacción de dos cuerpos, el fotón y el electrón. Como los rayos X tienen una energía

muy alta, podemos despreciar la energía de escapa de los electrones del metal, es decir que podemos imaginar el electrón, libre.



Para resolver el problema se debe considerar la conservación del momento y de la energía. Para la energía, usaremos la fórmula de Einstein para el electrón

$$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \quad (2.40)$$

y para el fotón, la formula $E = h\nu$. Por lo tanto, antes de la interacción, el fotón tiene una energía $h\nu$ y después de la interacción una energía $h\nu'$. Para el electrón, esta en reposo antes de la interacción, por lo tanto su energía es (con $p = 0$), mc^2 con m la masa del electrón aunque después de la interacción, se mueve y por lo tanto su energía es $\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$. La conservación de la energía implica

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \quad (2.41)$$

lo que podemos escribir

$$h(\nu - \nu') + mc^2 = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \quad (2.42)$$

y tomando el cuadrado

$$m^2c^4 + p^2c^2 = h^2(\nu - \nu')^2 + m^2c^4 + 2hmc^2(\nu - \nu') \quad (2.43)$$

es decir

$$p^2 = \frac{h^2}{c^2}(\nu - \nu')^2 + 2hm(\nu - \nu') \quad (2.44)$$

Ahora usaremos la conservación del momento. Antes de la interacción, el fotón tiene un momento $h\nu/c \vec{e}_x$ aunque el electrón tiene un momento nulo. Aunque después de la interacción el fotón tiene un momento

$$\frac{h\nu'}{c} \left(\cos \theta \vec{e}_x - \sin \theta \vec{e}_y \right) \quad (2.45)$$

aunque el electrón tiene un momento

$$p \left(\cos \phi \vec{e}_x + \sin \phi \vec{e}_y \right) \quad (2.46)$$

Lo que nos da como ecuación en ambas direcciones

$$\begin{cases} \frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \theta + p \cos \phi \\ 0 = -\frac{h\nu'}{c} \sin \theta + p \sin \phi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} p \cos \phi = \frac{h}{c} (\nu - \nu' \cos \theta) \\ p \sin \phi = \frac{h\nu'}{c} \sin \theta \end{cases} \quad (2.47)$$

Sumando ambos cuadrados para eliminar el ángulo ϕ , obtenemos

$$p^2 = \frac{h^2}{c^2} \left[(\nu - \nu' \cos \theta)^2 + \nu'^2 \sin^2 \theta \right] \quad (2.48)$$

es decir

$$p^2 = \frac{h^2}{c^2} \left[\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta \right] \quad (2.49)$$

Igualando las ecuaciones (2.44) y (2.49), obtenemos

$$\frac{h^2}{c^2} (\nu - \nu')^2 + 2hm(\nu - \nu') = \frac{h^2}{c^2} \left[\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta \right] \quad (2.50)$$

$$\Leftrightarrow 2hm(\nu - \nu') = 2\frac{h^2}{c^2} \nu\nu'(1 - \cos \theta) \quad (2.51)$$

$$\Leftrightarrow m \left(\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} \right) = \frac{h}{c^2} (1 - \cos \theta) \quad (2.52)$$

Pero como $\lambda = c/\nu$

$$mc(\lambda' - \lambda) = h(1 - \cos \theta) \quad (2.53)$$

es decir

$$\lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos \theta), \quad \text{con } \lambda_c = \frac{h}{mc} \quad (2.54)$$

donde $\lambda_c = 1,426 \cdot 10^{-3}$ nm, es la longitud de onda de Compton del electrón. Por lo tanto, se encuentra que no se produce ningún cambio en la longitud de onda para la

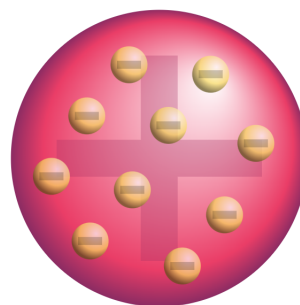
dispersión estrictamente hacia adelante (es decir, $\theta = 0$), mientras que es máxima para el caso de dispersión completamente hacia atrás (es decir, $\theta = \pi$). En vista del pequeño valor de λ_c , se deduce que el efecto sólo será importante y medible para longitudes de onda suficientemente cortas, como ocurre con los rayos X y gamma. En estas longitudes de onda un fotón es lo suficientemente energético como para que un electrón poco ligado (a un átomo) aparezca esencialmente como "libre" y el fotón se disperse elásticamente de la manera calculada anteriormente. En el caso de que un fotón incida sobre un electrón fuertemente ligado, el fotón se dispersa por todo el átomo al que está ligado el electrón. Se puede usar este efecto para medir el valor de la constante de Planck.

3. La estructura del átomo

3.1 El modelo atómico de Thomson

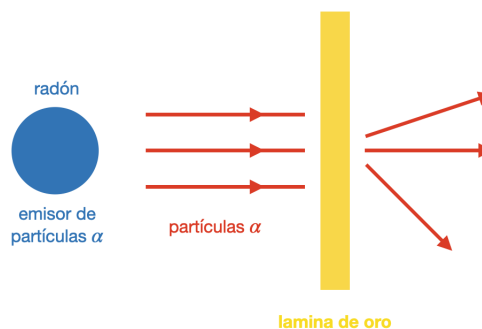
A finales del siglo XIX, la opinión predominante sobre el átomo era que era indivisible y la unidad más pequeña de la materia, como sugería la teoría atómica de Dalton. Esta visión empezó a cambiar cuando J.J. Thomson, a través de sus experimentos con rayos catódicos en 1897, descubrió el electrón, una partícula subatómica con carga negativa. Este descubrimiento implicaba que los átomos no eran indivisibles, sino que tenían una estructura interna.

Para dar cabida a la presencia de electrones, Thomson propuso su modelo atómico en 1904, que se conoció como el "modelo del pudín" o "modelo de pastel de pasas". En este modelo, sugirió que el átomo era una gran esfera cargada positivamente en la que estaban incrustados los electrones. La carga positiva se extendía uniformemente por todo el átomo, proporcionando un medio en el que se dispersaban los electrones cargados negativamente. Esto era análogo a ciruelas (los electrones) incrustadas en un pudín (la materia cargada positivamente), de ahí el nombre en inglés, "plum pudding model". El modelo de Thomson fue revolucionario porque cuestionaba la noción de que los átomos eran sólidos e indivisibles. Al introducir el concepto de partículas subatómicas, abrió la puerta a la exploración de la estructura interna del átomo. La idea de que los electrones estaban distribuidos por una matriz cargada positivamente era un paso lógico dadas las limitadas pruebas experimentales disponibles en aquel momento. Thomson sabía que los átomos eran neutros en general, por lo que llegó a la conclusión de que debía existir algún tipo de carga positiva para contrarrestar la carga negativa de los electrones.



3.2 El modelo atómico de Rutherford

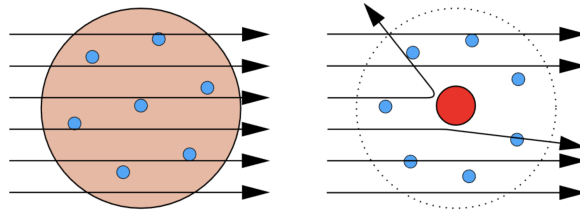
Entre los años 1909 y 1914, Ernest Rutherford⁴ y sus estudiantes Stans Geiger y Ernest Marsden hicieron una serie de experimentos para entender la estructura de los átomos. El experimento consiste en enviar partículas α , es decir un conjunto de 2 protones y 2 neutrones (lo que no se sabía en la época) emitidos por



⁴Fue estudiante de Thomson

una fuente radioactiva como el radón. Estos átomos pasan por una delgada lamina de oro, aunque la mayoría pasan sin ningún desvío, lo que muestra la porosidad del material, otras partículas salen con una dispersión. Fue difícil entender estas observaciones con el modelo atómico de Thomson. Como las partículas α tienen una carga positiva, Rutherford concluyó que

- Si la mayor parte de las partículas α no tienen desviación, podemos concluir que hay mucho vacío en los átomos.
- Si toda la carga positiva del átomo se encuentra concentrada en un solo punto central y no distribuida en todo el átomo, la repulsión eléctrica será mucho mayor.



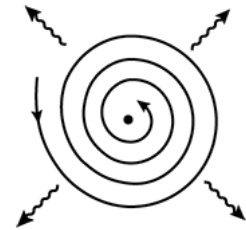
En el caso del modelo de Thomson, porque la carga positiva está dispersa, no deberíamos observar desviaciones importantes de las partículas α , aunque en el modelo de Rutherford la interacción electromagnética es mucho más fuerte

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(2e)(Ze)}{r^2} \quad (3.1)$$

con $+2e$ la carga de las partículas α y $+Ze$ la carga del núcleo.

Aunque muy interesante, este modelo tenía sus problemas. Si se supone que los electrones están estacionarios, por lo tanto deberían caer hacia el núcleo bajo la fuerza de Coulomb. Por lo tanto, los electrones deberían circular alrededor del núcleo en órbitas similares a la de los planetas alrededor del sol. Es una estructura mecánicamente estable. Pero los electrones tienen una carga y según la teoría de Maxwell todo cuerpo cargado acelerado radia energía en forma de radiación electromagnética.

Es decir que estos electrones deberían perder energía y caer hacia el núcleo. Además de que deberíamos obtener una emisión de un espectro continuo de radiación lo cual nunca ha sido observado.



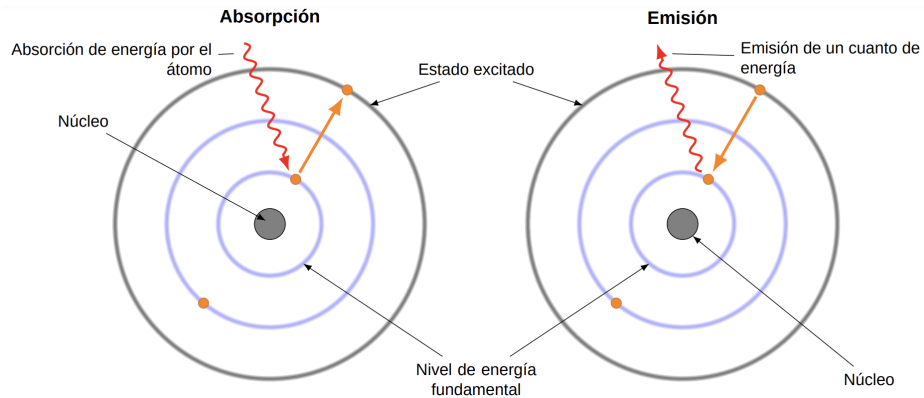
3.3 El modelo de Bohr

El problema principal del modelo de Rutherford es la estabilidad de las electrones. Por esa razón, Bohr enunció cuatro postulados:

- Postuló que los electrones en los átomos están confinados en ciertos niveles energéticos y órbitas estables, no radiantes, conocidos como estados estacionarios, porque la energía es fija o estacionaria.
- El electrón se mueve en órbitas circulares alrededor del núcleo.
- El electrón puede moverse de una órbita estacionaria estable a otra. Durante este cambio de órbita, se emite o absorbe un fotón de frecuencia la diferencia de las energías

$$E_i - E_f = h\nu$$

con E_i la energía inicial y E_f la energía final. En caso que $E_i - E_f < 0$, el sistema absorbe un fotón aunque si $E_i - E_f > 0$, el sistema emite un fotón.



- Para que la onda se ha estacionaria, debe haber un número entero de longitudes de onda en el perímetro de la órbita. Es como una onda en una caja, la solución estacionaria es la que tiene una onda proporcional al tamaño de la caja, lo que implica que

$$2\pi r = n\lambda \tag{3.2}$$

con n un entero positivo y r el radio de la órbita. Pero como el momento angular es $L = pr$ y $p = h/\lambda$ obtenemos

$$L = pr = \frac{h n\lambda}{\lambda 2\pi} = \frac{h}{2\pi} n \equiv \hbar n \tag{3.3}$$

Es decir que el momento angular es también discretizado o cuantizado.

Considerando el átomo de hidrógeno, para que el electrón sea en una órbita estable, la fuerza de Coulomb debe ser igual a la fuerza centrípeta

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \Rightarrow v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mr} \quad (3.4)$$

Como la energía total del sistema es la suma de la energía cinética y de la energía potencial, $E = E_c + E_p$, con

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2, \quad \text{y} \quad E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (3.5)$$

obtenemos

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (3.6)$$

Observamos que la energía es negativa, es lo que se llama un estado ligado, es decir que tenemos que agregar energía al átomo para que el electrón sea libre. A partir de la ec.(3.4) y de la ec.(3.3) con $p = mv$, obtenemos

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0}{me^2} \hbar^2 n^2 = a_0 n^2 \quad (3.7)$$

con $a_0 = 52,9$ pm, el radio de Bohr. Estas órbitas corresponden a las únicas órbitas permitidas por el modelo. Como consecuencia, las energías se encuentran cuantizadas, también

$$E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \Rightarrow E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{n^2} \simeq -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV} \quad (3.8)$$

El estado de más baja energía se encuentra para $n = 1$ y se llama el estado fundamental aunque los otros estados se llaman estados excitados (primer, segundo, \dots). Finalmente para $n = \infty$, la energía es nula es decir que el electrón se encuentra libre pero con cero energía cinética. Para remover por completo el electrón del átomo de hidrógeno cuando se encuentra en el estado fundamental, se necesita una energía de 13,6 eV. Esta energía de 13,6 eV se llama la energía de ionización.

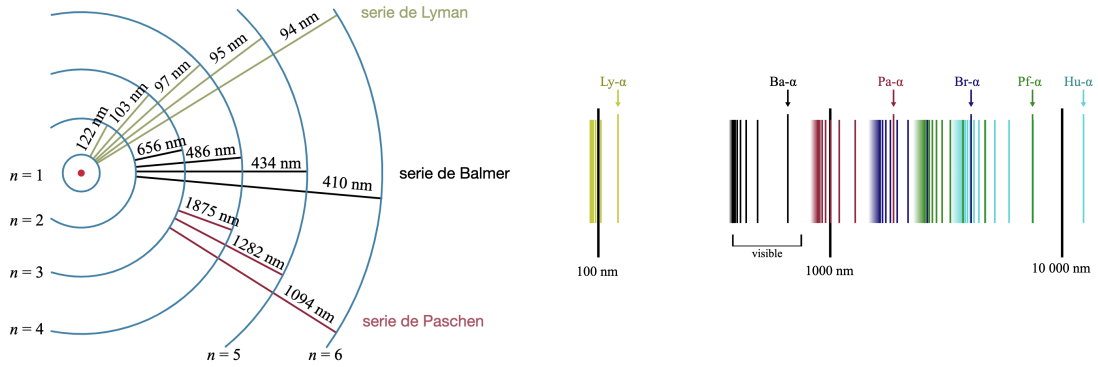
Cuando un fotón salta de una órbita exterior a una interior, la frecuencia del fotón emitido es $h\nu = E_i - E_f = \frac{hc}{\lambda}$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{hc} (E_i - E_f) = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 hca_0} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (3.9)$$

con (n_i, n_f) los números que caracterizan las orbitales inicial y final. Se puede ver que es la misma relación empírica obtenida por Balmer y Rydberg (2.13)

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (3.10)$$

con $R_H = e^2/8\pi\epsilon_0 h c a_0 = 1,09737 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.



Las transiciones hacia la órbita fundamental, se llaman serie de Lyman, hacia el primer modo excitado la serie de Balmer... lo que corresponde exactamente a lo que se observa.

Mecánica cuántica

4. Propiedades ondulatorias de la materia

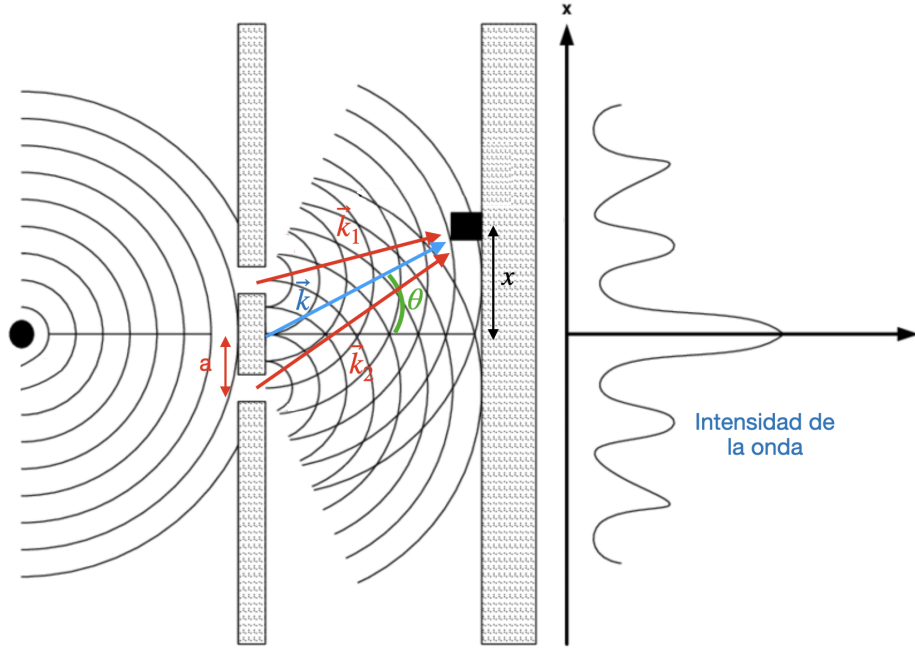
4.1 Dualidad onda-corpúsculo

Con el efecto fotoeléctrico y el efecto Compton hemos visto que la radiación electromagnética se comporta como una partícula, el fotón. ¿Eso Significa que debemos abandonar la teoría ondulatoria? Probablemente no. Para entender porque la idea de onda es relevante, necesitamos hacer un par de experimentos. En particular el experimento de doble rendija. Para eso, consideramos una onda plana monocromática emitida desde una fuente S . Una onda monocromática significa que esta compuesta de una sola frecuencia, aunque una onda plana tiene la forma siguiente (1.30)

$$\mathbf{E}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (4.1)$$

Por el principio de Fresnel-Huygens, las dos rendijas van a emitir la misma onda.

De hecho, el principio de Huygens, propuesto por Christiaan Huygens en 1678, afirma que cada punto de un frente de onda (una superficie sobre la que la onda tiene una fase constante) puede considerarse una fuente de ondículas esféricas secundarias. El frente de onda en cualquier momento posterior es la envoltura de estas ondículas secundarias. Este principio permite explicar la propagación de las ondas, incluidas la reflexión y la refracción. Augustin-Jean Fresnel amplió el principio de Huygens para incluir los efectos de interferencia, proporcionando una explicación más completa de los fenómenos de difracción. Fresnel introdujo la idea de que las ondículas secundarias emitidas desde puntos del frente de onda tienen amplitudes y fases diferentes, dependiendo de sus posiciones. Al considerar la superposición de estas ondículas, Fresnel pudo explicar los patrones de interferencia observados en los experimentos.



Los campos emitidos de cada rendija son

$$\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_{10}e^{-i(\omega t - \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1)}, \quad \mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_{20}e^{-i(\omega t - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} \quad (4.2)$$

Por lo tanto, en el punto en negro se debería observar la suma de ambos campo

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_{10}e^{-i(\omega t - \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1)} + \mathbf{E}_{20}e^{-i(\omega t - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} \quad (4.3)$$

$$= e^{-i\omega t} \left(\mathbf{E}_{10}e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} + \mathbf{E}_{20}e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \right) \quad (4.4)$$

Pero como la intensidad luminosa es proporcional (1.29) a $|\mathbf{E}|^2$, obtenemos una intensidad

$$I \propto |\mathbf{E}|^2 = \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^* = \mathbf{E}_{10}^2 + \mathbf{E}_{20}^2 + 2\mathbf{E}_{10} \cdot \mathbf{E}_{20} \cos(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2) \quad (4.5)$$

Se suponemos que la pantalla se encuentra a gran distancia, podremos aproximar $\mathbf{k}_1 \simeq \mathbf{k}_2 \simeq \mathbf{k}$, lo que implica

$$I \propto \mathbf{E}_{10}^2 + \mathbf{E}_{20}^2 + 2\mathbf{E}_{10} \cdot \mathbf{E}_{20} \cos(\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \quad (4.6)$$

Pero

$$\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -2ka \sin \theta = -\frac{4\pi a}{\lambda} \sin \theta \simeq -\frac{4\pi a}{\lambda} \frac{x}{D} \equiv -\delta \quad (4.7)$$

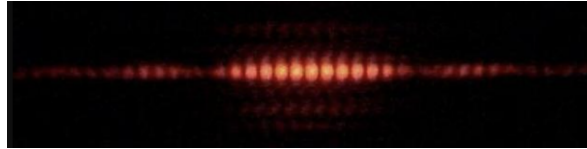
es decir

$$I \propto \mathbf{E}_{10}^2 + \mathbf{E}_{20}^2 + 2\mathbf{E}_{10} \cdot \mathbf{E}_{20} \cos \delta \quad (4.8)$$

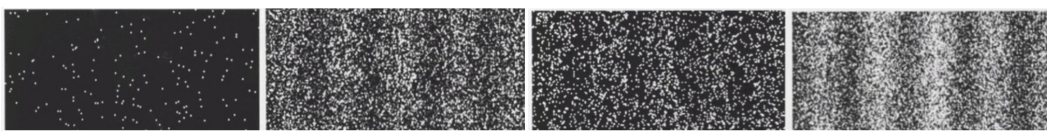
δ tiene que ver con la posición en la pantalla x . Por lo tanto

- Si $\delta = 2n\pi$, es decir $x = \frac{\lambda D}{2a}n$, la intensidad es máxima $I \propto (E_{10} + E_{20})^2$, se llama una interferencia constructiva
- Si $\delta = (2n+1)\pi$, es decir $x = \frac{\lambda D}{4a} + \frac{\lambda D}{2a}n$, la intensidad es mínima $I \propto (E_{10} - E_{20})^2$, se llama una interferencia destructiva

Por lo tanto, una visión ondulatoria produce un sistema de interferencia sobre la placa, es decir de máximo y mínimo en la intensidad. Eso fue el trabajo de Thomas Young en el año 1801.



Tenemos que aceptar que podemos describir la luz como una onda y una partícula, pero parecen dos ideas antinómicas. El fotón es una partícula localizada que parece no poder producir estas interferencias. Para verificarlo, podemos alejar la pantalla de observación o disminuir la intensidad de la luz, para tener poca luz que choca contra la pantalla o de forma equivalente pocos fotones. Podemos en el caso extremo, imaginar que un solo fotón pasa a la vez.



En este caso si observamos la placa, podemos ver al inicio un par de impactos por fotones, que aparecen aleatorio pero con tiempo los fotones chocan siempre en zonas para formar una estructura de interferencia, es decir con franjas brillantes e oscuras.

Los fotones vienen del mismo lugar, preparado de la misma manera pero no golpean la placa en el mismo lugar, por lo tanto este experimento nos incita a abandonar uno de los pilares de la mecánica clásica, es decir el determinismo. Pero solamente podemos predecir su probabilidad de impacto. El fotón se comporta como una partícula y como una onda según las situaciones, es la dualidad onda-corpúsculo. En el año 1924 Louis

de Broglie enunció una hipótesis mucho más fuerte; toda materia no solo los fotones tienen propiedades de onda y partícula. Es decir que los electrones, protones . . . tienen también un comportamiento de onda. Si una partícula tiene una energía E y un momento \mathbf{p} , se le asocia una onda de frecuencia angular ω y vector de onda \mathbf{k} tal que

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi}{k} \quad (4.9)$$

La naturaleza ondulatoria de los electrones fue confirmada experimentalmente por Clinton Davisson y Lester Germer, en el año 1927, que observaron patrones de difracción de electrones, similares a los observados con las ondas luminosas, cuando los electrones se dispersaban por una red cristalina.

Obviamente nos podemos preguntar porque no somos una onda si todas las partículas tienen un comportamiento de onda. La razón es sencilla, para un objeto de 1 kg, con velocidad de $1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, obtenemos

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \simeq 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ m} \quad (4.10)$$

Por lo tanto, según los resultados pasados, en un sistema de interferencia, las franjas brillantes se encuentran separadas por una distancia de

$$x = \frac{\lambda D}{2a} \simeq 10^{-34} \text{ m} \quad (4.11)$$

Claramente, se observará una pantalla totalmente brillante es decir sin fenómeno visible de interferencia es decir de efectos ondulatorios.

En conclusión la dualidad es un concepto clave. Fue reformulado por Niels Bohr bajo el concepto de complementariedad: los aspectos de onda y de partícula son complementarios, lo que significa que puede observarse cualquiera de los dos aspectos, pero no ambos simultáneamente. El comportamiento observado depende del tipo de medición realizada. Esta forma de ver la mecánica cuántica nos dice que no podemos tener acceso a la naturaleza de un sistema aislado. Todo lo que podemos decir es cuando este sistema está en contacto con un aparato de medición. Este sistema + aparato puede darnos propiedades ondulatorias o corpusculares según el aparato de medición que usamos y por tanto según la interacción que tenemos con el sistema. La mecánica cuántica no nos dice sobre la naturaleza de los objetos pero puede predecir el resultado de los experimentos posibles.

En mecánica cuántica, las partículas se describen mediante el concepto de función de onda, $\psi(t, \mathbf{r})$, entidades matemáticas que contienen información sobre la probabilidad de encontrar una partícula en un lugar o estado determinado. La función de onda puede

mostrar patrones de interferencia, pero cuando se realiza una medición, la función de onda "colapsa" en una posición o estado concreto, reflejando la naturaleza de partícula del resultado observado.

4.2 Indeterminación de Heisenberg

Para caracterizar completamente el estado cuántico de una partícula o sistema de partículas, la función de onda es un concepto fundamental. Proporciona una descripción completa del comportamiento de una partícula y contiene toda la información necesaria para determinar sus propiedades físicas. La función de onda, típicamente denotada como $\psi(t, \mathbf{x})$, es una función de valor complejo del tiempo t y la posición \mathbf{x} . Su naturaleza compleja le permite captar información tanto de amplitud como de fase. La función de onda en sí no representa una cantidad física, sino una amplitud de probabilidad. La densidad de probabilidad $|\psi(t, \mathbf{x})|^2$ da la probabilidad de encontrar la partícula en la posición \mathbf{x} en el tiempo t . Esta función de onda evoluciona en el tiempo según una ecuación que veremos más adelante, la ecuación de Schrödinger. Una de las características importantes de la función de onda es que debe normalizarse de forma que $|\psi(t, \mathbf{x})|^2$ se integre a 1 en todo el espacio, reflejando la certeza de que la partícula existe en algún lugar del universo.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(t, \mathbf{x})|^2 d^3x = 1 \quad (4.12)$$

Esta normalización tiene consecuencias muy importantes, de hecho significa que multiplicar $\psi(t, \mathbf{x})$ por una constante no cambia la función de onda. Lo que la distingue de las ondas "normales" como un sonido o una onda electromagnética, porque para los últimos multiplicar por un factor cambia la amplitud de la onda, por lo que la intensidad.

Imaginamos que nuestra función de onda es una onda plana

$$\psi(t, \mathbf{r}) = Ae^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \quad (4.13)$$

que tiene por lo tanto un momento bien definido, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, pero $|\psi(t, \mathbf{r})| = |A|^2$, lo que no es integrable, así que en principio no puede representar un estado cuántico. Pero si continuamos la discusión, observamos que tenemos la misma probabilidad de encontrar la partícula en todo el universo es decir que la partícula no está localizada, su posición es indefinida. En resumen, si $\Delta p = 0$, $\Delta x = \infty$.

Consideremos un paquete de ondas descrito por una función de onda $\psi(x)$, que puede expresarse como una superposición de ondas planas

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k)e^{ikx} dk \quad (4.14)$$

Aquí, $\phi(k)$ es la transformada de Fourier de $\psi(x)$, que representa la amplitud de cada componente de onda con número de onda k . La condición de normalización para la función de onda es:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (4.15)$$

Del mismo modo, la transformada de Fourier $\phi(k)$ se normaliza por

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(k)|^2 dk = 1 \quad (4.16)$$

La incertidumbre en la posición, Δx , y la incertidumbre en el número de onda, Δk , vienen dadas por las desviaciones típicas de $|\psi(x)|^2$ y $|\phi(k)|^2$, respectivamente

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(x)|^2 dx \quad (4.17)$$

$$(\Delta k)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (k - \langle k \rangle)^2 |\phi(k)|^2 dk \quad (4.18)$$

donde $\langle x \rangle$ y $\langle k \rangle$ son los valores esperados

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx \quad (4.19)$$

$$\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} k |\phi(k)|^2 dk \quad (4.20)$$

Sin pérdida de generalidad, tomaremos $\langle x \rangle = \langle k \rangle = 0$ es decir que

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx \quad (4.21)$$

$$(\Delta k)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} k^2 |\phi(k)|^2 dk \quad (4.22)$$

Usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|^2 dx \right) \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) g(x) dx \right|^2 \quad (4.23)$$

para $f(x) = x\psi(x)$ y $g(x) = i\frac{d}{dx}\psi(x)$, obtenemos

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} |x\psi(x)|^2 dx \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx \right) \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} ix\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx \right|^2$$

La primera integral es

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\psi(x)|^2 dx = (\Delta x)^2 \quad (4.24)$$

aunque la segunda es

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |k\phi(k)|^2 dk = (\Delta k)^2 \quad (4.25)$$

Sabemos que para los números complejos

$$|z|^2 = (\operatorname{Re}(z))^2 + (\operatorname{Im}(z))^2 \geq (\operatorname{Im}(z))^2 = \left(\frac{z - z^*}{2i} \right)^2 \quad (4.26)$$

por lo tanto

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} ix\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx \right|^2 \geq -\frac{1}{4} \left(\int_{-\infty}^{\infty} ix\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx + \int_{-\infty}^{\infty} ix\psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} dx \right)^2$$

haciendo una integración por partes sobre la primera integral, obtenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} ix\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} i\psi^*(x)\psi(x) dx - \int_{-\infty}^{\infty} ix\psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} dx \quad (4.27)$$

lo que implica

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} ix\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx \right|^2 \geq \frac{1}{4} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x) dx \right)^2 = \frac{1}{4} \quad (4.28)$$

En conclusión, de la ec.(4.24) obtenemos

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (4.29)$$

Pero como $k = p/\hbar$, obtenemos

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.30)$$

conocida como el principio de incertidumbre o relación de indeterminación de Heisenberg.

Este resultado, matemáticamente sencillo pero con fuertes implicaciones físicas, fue formulado por Werner Heisenberg en 1927. Afirma que existen limitaciones inherentes a la precisión con la que podemos conocer simultáneamente la posición y el momento.

Heisenberg ilustró su principio utilizando experimentos mentales, como el "microscopio de rayos gamma", para demostrar que intentar medir la posición de una partícula con mayor precisión conduce a una mayor incertidumbre en su momento. Cuando se utiliza un fotón para observar un electrón, la interacción perturba el momento del electrón, lo que demuestra la compensación inherente entre la precisión en la posición y el momento. Inicialmente, el principio fue interpretado como una limitación debida a las perturbaciones causadas por la medición, pero la interpretación más aceptada es que el principio de incertidumbre refleja una indeterminación inherente a los sistemas cuánticos. La función de onda representa un límite fundamental a la precisión con la que pueden conocerse determinados pares de propiedades, independientemente de la medición. El principio de incertidumbre surge de la dualidad onda-partícula de la materia. Las partículas, como los electrones, presentan propiedades tanto ondulatorias como de partículas. Esta dualidad significa que intentar medir la posición exacta de una partícula perturba su momento, y viceversa. Este principio de incertidumbre tiene profundas implicaciones para nuestra comprensión de la naturaleza. Implica que, a un nivel fundamental, el universo es inherentemente probabilístico en lugar de determinista. Esto, desafía las nociones clásicas de predictibilidad precisa y determinismo. Es importante, mencionar que esta incertidumbre relaciona variables conocidas como variables conjugadas, como la posición x y el momento en la dirección x , de forma que

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.31)$$

o

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.32)$$

Pero no hay restricciones en la medición de variables que no son conjugadas como x y p_y por ejemplo.

Sin entrar en detalles, existe otra desigualdad relacionada con la medida de la energía y la medida del tiempo

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.33)$$

El principio implica que si la energía de un sistema se mide con precisión (ΔE es pequeña), la duración (Δt) durante la cual el sistema puede permanecer en ese estado es incierta. Por el contrario, si la energía es incierta, el intervalo de tiempo puede conocerse con mayor precisión.

5. Ecuación de Schrödinger

Para construir la ecuación fundamental, llamada ecuación de Schrödinger para la función de onda $\psi(t, \mathbf{r})$, tenemos que considerar los tres aspectos visto previamente. Se debe incorporar la idea que nuestro sistema está descrito por partículas, pero también que está descrito por ondas, es decir la dualidad onda-corpúsculo y finalmente debemos usar la relación de de Broglie que relaciona los 2 conceptos a través de la ecuación

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \quad (5.1)$$

Para ser una partícula clásica, debe tener una energía descrita por

$$E = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + V(\mathbf{r}) \quad (5.2)$$

con $V(\mathbf{r})$ la energía potencial según el problema estudiado. Como $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, obtenemos

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (5.3)$$

Ahora, considerando que tenemos una onda, la podemos describir por una onda plana de ecuación

$$\psi(t, \mathbf{r}) = Ae^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (5.4)$$

lo que implica

$$\frac{\partial \psi(t, \mathbf{r})}{\partial t} = -i\omega Ae^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} = -i\omega \psi(t, \mathbf{r}) = -i\frac{E}{\hbar} \psi(t, \mathbf{r}) \quad (5.5)$$

$$\Delta \psi(t, \mathbf{r}) = -\mathbf{k}^2 \psi(t, \mathbf{r}) = -\frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \psi(t, \mathbf{r}) \quad (5.6)$$

donde hemos usando la relación $E = h\nu = \hbar\omega$. Usando estas relaciones en la ec.(2.9) obtenemos

$$i\hbar \frac{1}{\psi(t, \mathbf{r})} \frac{\partial \psi(t, \mathbf{r})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(t, \mathbf{r})} \Delta \psi(t, \mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \quad (5.7)$$

lo que podemos finalmente escribir

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, \mathbf{r})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(t, \mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(t, \mathbf{r}) \quad (5.8)$$

En el caso de estudiar una situación estacionaria, es decir que no estudiaremos la dependencia temporal, podremos siempre regresar a la parte izquierda original e escribir

$$E\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (5.9)$$

conocida como la ecuación de Schrödinger estacionaria. Será la ecuación estudiada en este curso.

Erwin Schrödinger se inspiró para formular su famosa ecuación tras asistir a un seminario de Louis de Broglie en 1925. Pero al principio se mostró reacio a aceptar la interpretación probabilística de su función de onda, propuesta por Max Born. Born sugería que la magnitud al cuadrado de la función de onda representaba una densidad de probabilidad, que describía la probabilidad de encontrar una partícula en un lugar determinado. Schrödinger prefería una visión determinista y encontraba preocupante la naturaleza probabilística de la mecánica cuántica. Por eso diseñó su experimento mental, sobre cierto gato. El experimento considera un gato dentro de una caja sellada, junto con un átomo radiactivo, un contador Geiger, un frasco de veneno y un martillo. Si el contador Geiger detecta la radiación del átomo (que decae con una probabilidad del 50% en un tiempo determinado), el martillo rompe el frasco de veneno y mata al gato. Pero según la mecánica cuántica (o la interpretación de Copenhague), hasta que no se abre la caja y se observa el sistema, el átomo existe en una superposición de estados. En consecuencia, el gato está simultáneamente vivo y muerto, lo que representa una superposición de estados. Aunque se han producido muchos pensamientos y escritos sobre este gato, la solución viene finalmente por algo llamado decoherencia.

Los sistemas macroscópicos, como el gato de Schrödinger, interactúan constantemente con innumerables partículas de su entorno (moléculas de aire, fotones, etc.). Pero cuando un sistema cuántico interactúa con su entorno, la información sobre sus estados superpuestos se enreda con el entorno, "promediando" la superposición y haciendo que parezca que el sistema ha colapsado a un estado definido. Debido a la decoherencia, la coherencia entre los estados superpuestos (vivo y muerto) se pierde rápidamente y el sistema pasa a ser una mezcla estadística. Este proceso ocurre en escalas de tiempo extremadamente cortas, lo que hace que la superposición sea efectivamente inobservable.

El Premio Nobel de 2012 a Serge Haroche y David J. Wineland está relacionado con este tema. Utilizaron los llamados átomos de Rydberg, que son átomos con uno o más electrones en estados muy excitados. Estos átomos presentan propiedades cuánticas exageradas y son muy sensibles a los campos externos, lo que los convierte en candidatos excelentes para estudiar fenómenos cuánticos como la decoherencia.

El experimento consiste en colocar un átomo Rydberg dentro de una cavidad de microondas de alta calidad. La cavidad está diseñada para permitir un control preciso del campo electromagnético en su interior. Estos átomos se preparan inicialmente en una superposición de dos estados cuánticos. Para ello se utilizan pulsos láser o campos de microondas que impulsan de forma coherente las transiciones entre los estados atómicos. Una vez que los átomos están en superposición, interactúan con el campo de microondas dentro de la cavidad. El campo se encuentra inicialmente en una su-

perposición de diferentes números de fotones. La interacción del átomo con el campo de la cavidad provoca decoherencia. El entrelazamiento entre el átomo y el campo electromagnético de la cavidad provoca la pérdida de coherencia en la superposición atómica. Por último, se mide el estado del átomo tras salir de la cavidad. La pérdida de coherencia cuántica se observa midiendo la probabilidad de encontrar el átomo en cada uno de sus estados posibles. Cuanto más grande sea el sistema, menor será el tiempo de decoherencia⁵.

	Polvo (10^{-3} cm)	Molécula compleja (10^{-6} cm)
En el aire	10^{-36} s	10^{-30} s
Vacío de laboratorio (10^6 moléculas por centímetro cúbico)	10^{-23} s	10^{-17} s
Vacío perfecto + luz solar	10^{-21} s	10^{-13} s
Vacío intergaláctico + radiación de 3 K	10^{-6} s	10^{12} s \sim 32000 años

5.1 El pozo cuadrado infinito

El potencial de pozo cuadrado infinito es un problema prototípico de la mecánica cuántica que ilustra los conceptos fundamentales de cuantización y funciones de onda. Representa una partícula obligada a moverse en una región unidimensional con paredes perfectamente rígidas.

Imaginemos una partícula de masa m confinada en una caja unidimensional de anchura L con paredes impenetrables. La energía potencial $V(x)$ es cero dentro de la caja e infinita fuera. Matemáticamente, esto se describe por

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{para } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (5.10)$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula en un potencial $V(x)$ viene dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.11)$$

Dentro del pozo ($0 \leq x \leq L$), ya que $V(x) = 0$, la ecuación se simplifica a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (5.12)$$

⁵*Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, E. Joos, H.D. Zeh, C. Kiefer, D. Giulini, K. Kupsch, I.O. Stamatescu

Reordenando da

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (5.13)$$

Definiendo $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, así

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad (5.14)$$

La solución general de esta ecuación diferencial de segundo orden es

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (5.15)$$

donde A y B son constantes determinadas por las condiciones de contorno.

Debido a las barreras de potencial infinito en $x = 0$ y $x = L$, la función de onda debe desaparecer en estos puntos

- $\psi(0) = 0 : B = 0$ (ya que $\cos(0) = 1$)
- $\psi(L) = 0 : A \sin(kL) = 0$.

Para soluciones no triviales ($A \neq 0$), requerimos

$$\sin(kL) = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi \quad \text{donde } n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.16)$$

Así, k se cuantiza

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad (5.17)$$

Sustituyendo $k = \frac{n\pi}{L}$ en la expresión para k^2

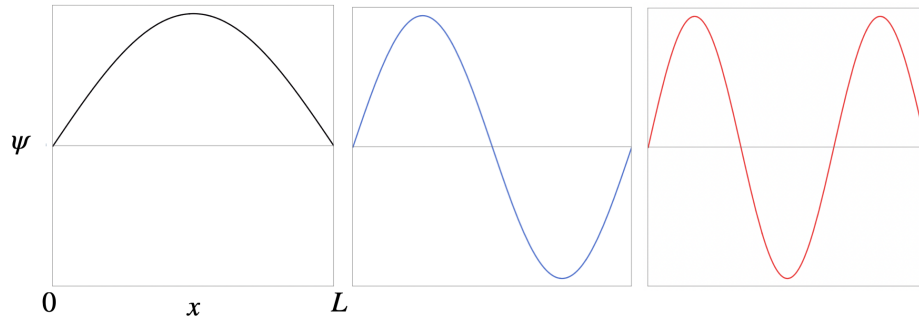
$$k^2 = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (5.18)$$

Resolviendo para E , los niveles de energía son

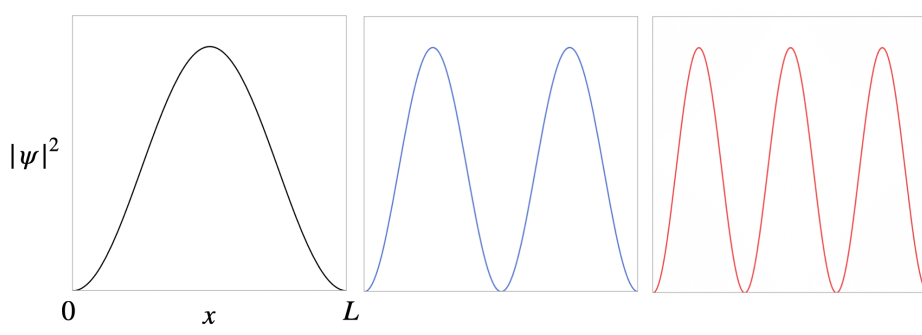
$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (5.19)$$

Finalmente, las correspondientes funciones de onda normalizadas vienen dadas por

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (5.20)$$



El número de nodos (cruces por cero) en una función de onda aumenta con n . Esto refleja que los estados de mayor energía tienen oscilaciones espaciales más complejas. Se ha representado los casos $n = 1, 2, 3$



La función ψ^2 representa la probabilidad de encontrar la partícula. Por ejemplo, observamos que para n par, la probabilidad de observar la partícula en el centro de la caja es nula.

5.2 Barrera de potencial y efecto túnel

El efecto túnel cuántico es un fenómeno mecánico cuántico muy importante en el que una partícula tiene una probabilidad de atravesar una barrera potencial, aunque su energía sea inferior a la altura de la barrera. Este efecto tiene importantes implicaciones en campos como la física nuclear, la tecnología de semiconductores y la informática cuántica.

Consideremos una partícula de masa m y energía E que se aproxima a una barrera de potencial unidimensional, definida como

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x > a \end{cases} \quad (5.21)$$

donde $V_0 > E$.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se resuelve en las tres regiones distintas. Para $x < 0$, el potencial $V(x) = 0$, y la ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (5.22)$$

La solución general es una combinación de ondas incidentes y reflejadas

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (5.23)$$

donde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

La solución e^{ikx} representa una onda incidente, es decir que se desplaza de la izquierda a la derecha, aunque e^{-ikx} representa una onda reflejada, es decir que se desplaza de la derecha a la izquierda.

En la segunda región, el potencial es $V(x) = V_0$, por lo que la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.24)$$

Reordenando los términos se obtiene

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x) \quad (5.25)$$

Definiendo $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$, la solución es

$$\psi_{II}(x) = Ce^{qx} + De^{-qx} \quad (5.26)$$

Finalmente para $x > a$, el potencial $V(x) = 0$ y por lo tanto el problema es similar al primer caso, con solución

$$\psi_{III}(x) = Ee^{ikx} + Fe^{-ikx} \quad (5.27)$$

Pero no parece muy físico tener una onda que nos viene de $x = +\infty$, lo que implica $F = 0$, es decir que tenemos solamente una onda transmitida.

$$\psi_{III}(x) = Ee^{ikx} \quad (5.28)$$

Para encontrar los coeficientes A, B, C, D , y E , aplicamos condiciones de contorno que requieren continuidad de la función de onda y su derivada en $x = 0$ y $x = a$.

En $x = 0$, tenemos

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \Rightarrow \quad A + B = C + D \quad (5.29)$$

$$\left. \frac{d\psi_I}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=0} \quad \Rightarrow \quad ik(A - B) = q(C - D) \quad (5.30)$$

En $x = a$,

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow Ce^{qa} + De^{-qa} = Ee^{ika} \quad (5.31)$$

$$\left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_{III}}{dx} \right|_{x=a} \Rightarrow q(Ce^{qa} - De^{-qa}) = ikEe^{ika} \quad (5.32)$$

La solución no trivial a estas condiciones es

$$B = \frac{(k^2 + q^2) \sinh(aq)}{2ikq \cosh(aq) + (k^2 - q^2) \sinh(aq)} A \quad (5.33)$$

$$C = \frac{2k(k - iq)}{(k - iq)^2 - e^{2aq}(k + iq)^2} \quad (5.34)$$

$$D = \frac{2e^{2aq}k(k + iq)}{-(k - iq)^2 + e^{2aq}(k + iq)^2} A \quad (5.35)$$

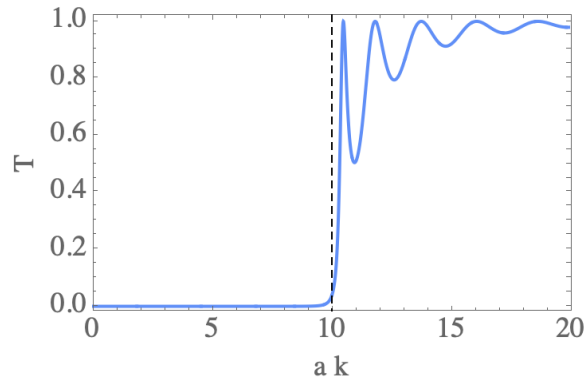
$$E = \frac{2ie^{-iak}kq}{2ikq \cosh(aq) + (k^2 - q^2) \sinh(aq)} A \quad (5.36)$$

Como el coeficiente E es diferente de cero, tenemos una probabilidad no nula de encontrar la partícula en $x \geq a$, es el efecto túnel. Podemos definir un coeficiente de transmisión y otro de reflexión de la función de onda. Se definen a partir de los coeficientes en salida E y en entrada B en comparación con el coeficiente de llegada de la onda es decir A . Por lo tanto, tenemos

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(1 + \frac{4k^2q^2}{(k^2 + q^2)^2 \sinh^2(aq)} \right)^{-1} \quad (5.37)$$

$$T = \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \left(\cosh^2(aq) + \frac{(k^2 - q^2)^2 \sinh^2(aq)}{4k^2q^2} \right)^{-1} \quad (5.38)$$

Obviamente, tenemos $R + T = 1$.



Se ha representado el coeficiente de transmisión para $2ma^2V_0/\hbar^2 = 100$. En línea discontinua, es el límite donde $E < V_0$ que corresponde a nuestro cálculo. Se puede

realizar exactamente el mismo cálculo para $E > V_0$, es sólo una continuación analítica del resultado anterior. Observamos que mientras que en la física clásica la probabilidad de encontrar una partícula al otro lado de la barrera para energías menores que la altura de la barrera es nula, en la descripción cuántica este tipo de partículas puede atravesar la barrera por un túnel y luego aparecer al otro lado de la barrera de potencial. Mientras que para $E > V_0$, en el mundo clásico, el factor de transmisión es uno, en el mundo cuántico, tenemos siempre una onda reflejada, lo que significa una probabilidad no nula de que la partícula no pase excepto para valores muy particulares de la energía o k conocidos como energías de resonancia.

Por supuesto, el efecto túnel supone un límite a la miniaturización de los componentes electrónicos, debido a los efectos de fuga debidos a este efecto. Sin embargo, puede utilizarse de forma positiva. Por ejemplo, el efecto túnel de Fowler-Nordheim es un tipo específico de efecto túnel que describe el comportamiento de los electrones cuando atraviesan una barrera de energía potencial en presencia de un campo eléctrico intenso. Este fenómeno es crucial en el funcionamiento de muchos dispositivos semiconductores, incluida la memoria flash. Supongamos que tenemos inicialmente una barrera de potencial. El campo eléctrico añade una pendiente de energía potencial a través de la barrera. Si la barrera original es $V(x)$ y se aplica un campo eléctrico E , la energía potencial en la posición x pasa a ser

$$V'(x) = V(x) - eEx \quad (5.39)$$

donde e es la carga elemental. Esta modificación da lugar a una barrera de forma triangular en lugar de rectangular, lo que reduce el máximo de energía que deben superar los electrones y la anchura de la barrera. Se utiliza para memorias flash. Es decir, que si se aplica un alto voltaje a la puerta de control, creando un fuerte campo eléctrico a través de la capa de óxido entre la puerta de control y la puerta flotante. Este campo permite que los electrones atraviesen la barrera de óxido y queden atrapados en la puerta flotante, almacenando así un bit de datos. Para borrarlo, se utiliza un alto voltaje negativo o una configuración de campo opuesta para eliminar los electrones de la puerta flotante invirtiendo la dirección del túnel.

5.3 El pozo potencial rectangular

Otro sistema solucionable y muy utilizado es el pozo de potencial rectangular finito. Cuando la energía es menor que V_0 , tenemos una partícula confinada o atrapada cuya energía se cuantiza. La función de potencial que corresponde a este sistema es

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x \leq -\frac{a}{2}, \quad x \geq \frac{a}{2} \\ 0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \end{cases} \quad (5.40)$$

Energías potenciales como ésta, se encuentran para por ejemplo, puntos cuánticos que son nanoestructuras semiconductoras que confinan electrones en las tres dimensiones espaciales, o en física nuclear, los pozos de potencial pueden modelar el comportamiento de los nucleones (protones y neutrones) dentro de un núcleo atómico.

Cuando $0 < E < V_0$, las soluciones de la ecuación de Schrödinger en las regiones I, II y III son, respectivamente,

$$\psi_{\text{I}}(x) = Ae^{qx} + Be^{-qx}, \quad \text{para } x \leq -\frac{a}{2} \quad (5.41)$$

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \quad \text{para } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}, \quad (5.42)$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = Ee^{qx} + Fe^{-qx}, \quad \text{para } \frac{a}{2} \leq x \quad (5.43)$$

con $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ y $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Dado que buscamos una solución física, debemos eliminar las funciones divergentes, es decir $B = E = 0$. Pidiendo como en el caso anterior continuidad de la función en $x = -a/2$ y $x = a/2$, obtenemos

En $x = -a/2$,

$$Ae^{-qa/2} = Ce^{-ika/2} + De^{ika/2} \quad (5.44)$$

$$qAe^{-qa/2} = ik(Ce^{-ika/2} - De^{ika/2}) \quad (5.45)$$

En $x = a/2$,

$$Ce^{ika/2} + De^{-ika/2} = Fe^{-qa/2} \quad (5.46)$$

$$ik(Ce^{ika/2} - De^{-ika/2}) = -Fqe^{-qa/2} \quad (5.47)$$

Existe una solución trivial, que corresponde a $A = C = D = F = 0$. Obviamente, buscamos otra solución, por lo tanto hay que pedir que el determinante del sistema es nulo

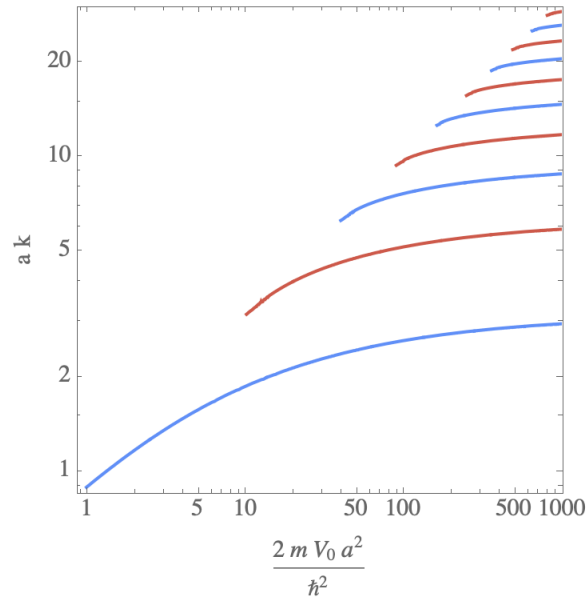
$$\det \begin{pmatrix} e^{-qa/2} & -e^{-ika/2} & -e^{ika/2} & 0 \\ qe^{-qa/2} & -ike^{-ika/2} & ike^{ika/2} & 0 \\ 0 & e^{ika/2} & e^{-ika/2} & -e^{-qa/2} \\ 0 & ike^{ika/2} & -ike^{-ika/2} & qe^{-qa/2} \end{pmatrix} = 0 \quad (5.48)$$

es decir

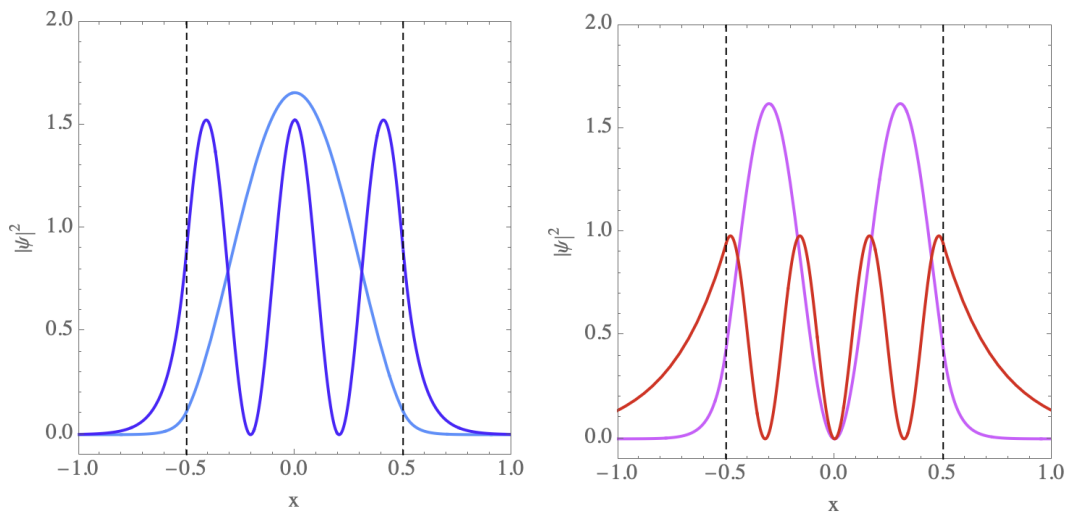
$$q = -k \cot \left(\frac{ak}{2} \right) \quad (5.49)$$

$$q = k \tan \left(\frac{ak}{2} \right) \quad (5.50)$$

Tenemos 2 soluciones que corresponden a una cuantización de la energía, ya que q y k dependen de E



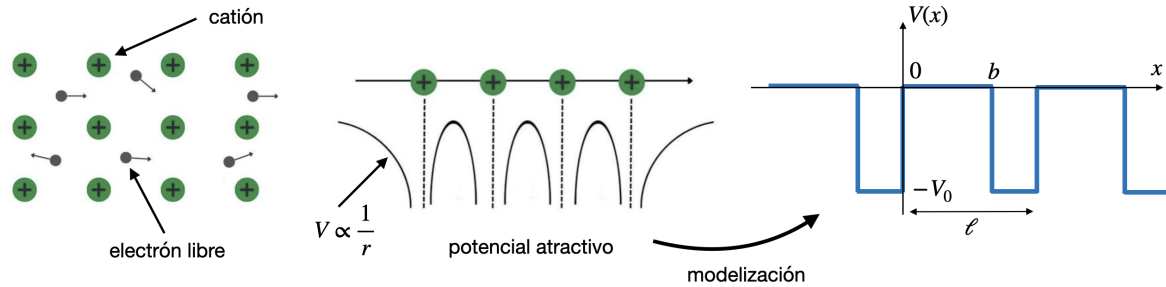
En azul, se representan en función del parámetro $2mV_0a^2/\hbar^2$, las soluciones de la ec.(5.50) y en rojo las soluciones de la ec.(5.49). Se observa que para un valor del parámetro dado, el numero de soluciones es finito e aumenta a menudo que aumenta $2mV_0a^2/\hbar^2$. Bajo estas condiciones, observamos que $F = A$ para el caso (5.50) y $F = -A$ para el caso (5.49), es decir una función de onda par o impar. A continuación se representa la probabilidad de encontrar la partícula para $a = 1$ y $2mV_0a^2/\hbar^2 = 100$ por lo cual tenemos 4 estados solución de las ec.(5.49,5.50)



Existe una probabilidad no nula de encontrar la partícula en $|x| > a/2$.

5.4 Modelo de Kronig-Penney

En un sólido, los átomos forman una red cristalina con núcleos que se distribuyen de forma periódica. Los electrones de valencia pueden ser considerados como libre y se mueven en esta estructura, es el modelo de los electrones libre.

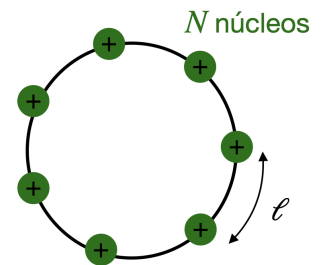


En una dimensión, el potencial que los electrones libre ven está modelizado en la figura previa. Está modelización corresponde al modelo de Kronig-Penney. Es un modelo suficientemente simple para que sea soluble analíticamente y entender la estructura de bandas. Antes de estudiar este modelo, necesitamos un resultado importante, llamado el teorema de Bloch, lo que corresponde a un caso particular del teorema de Floquet:

Para un problema cuántico periódico es decir que el potencial es periódico $V(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = V(\mathbf{r})$, la función de onda se escribe

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_k(\mathbf{r}) \quad \text{con} \quad u_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = u_k(\mathbf{r})$$

Por lo tanto, aunque u_k es periódica, la función de onda Ψ no es periódica. Obviamente la probabilidad de encontrar el electrón $|\Psi|^2 = |u_k|^2$ es periódica. La demostración de este teorema es simple y se encuentra en muchos libros. Para ganar un poco de intuición, lo vamos a demostrar en el caso de un anillo. Por las simetrías del problema (traslación) podemos imaginar que



$$\Psi(x + \ell) = C\Psi(x)$$

con C una constante. Por lo tanto, tenemos $\Psi(x + 2\ell) = C\Psi(x + \ell) = C^2\Psi(x)$ y de forma iterativa

$$\Psi(x + N\ell) = C^N\Psi(x) \tag{5.51}$$

Pero como estamos en un anillo, regresamos al mismo punto, es decir $\Psi(x + N\ell) = \Psi(x)$ lo que implica $C^N = 1$ es decir

$$C_n = e^{2i\pi \frac{n}{N}} \quad \text{con } n = \{0, 1, \dots, N - 1\} \quad (5.52)$$

o definiendo $k = \frac{2\pi n}{N\ell}$, obtenemos

$$C_k = e^{ik\ell} \quad \text{con } k = \left\{ 0, \frac{2\pi}{N\ell}, \dots, \frac{2\pi(N-1)}{N\ell} \right\} \quad (5.53)$$

Por lo tanto si redefinimos $\Psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$, tendremos

$$\Psi(x + \ell) = e^{ik(x+\ell)} u_k(x + \ell) \quad (5.54)$$

pero

$$\Psi(x + \ell) = C_k \Psi(x) = C_k e^{ikx} u_k(x) = e^{ik(x+\ell)} u_k(x) \quad (5.55)$$

lo que implica

$$u_k(x + \ell) = u_k(x) \quad (5.56)$$

es decir que u es periódico. Lo que termina la demostración. Regresando ahora a nuestra problema, por la periodicidad podemos estudiar la ecuación de Schrödinger sobre un periodo, por ejemplo en la zona $x \in [b - \ell, b]$. En esta zona, el potencial es

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } x \in [b - \ell, 0] \\ 0 & \text{si } x \in [0, b] \end{cases} \quad (5.57)$$

En la zona $[0, b]$, tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi(x) \quad (5.58)$$

lo que podemos escribir

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \alpha^2\Psi(x) = 0 \quad \text{con } \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (5.59)$$

con solución

$$\Psi_1(x) = C_1 e^{i\alpha x} + C_2 e^{-i\alpha x} \quad (5.60)$$

En la zona $[b - \ell, 0]$, el potencial $V(x) = -V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} - V_0\Psi = E\Psi \quad (5.61)$$

es decir

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \beta^2\Psi(x) = 0 \quad \text{con } \beta = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad (5.62)$$

lo que tiene como solución

$$\Psi_2 = C_3 e^{i\beta x} + C_4 e^{-i\beta x} \quad (5.63)$$

Debemos fijar las condiciones de continuidad en $x = 0$, es decir

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \quad (5.64)$$

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \quad (5.65)$$

Pero al mismo tiempo, la función $u_k(x) = \Psi(x)e^{-ikx}$ debe ser periodica, es decir $u_k(b) = u_k(b - \ell)$ y $u_k'(b) = u_k'(b - \ell)$, lo que fija en total 4 condiciones

$$C_1 + C_2 = C_3 + C_4$$

$$i\alpha C_1 - i\alpha C_2 = i\beta C_3 - i\beta C_4$$

$$C_1 e^{i(\alpha-k)b} + C_2 e^{-i(\alpha+k)b} = C_3 e^{i(\beta-k)(b-\ell)} + C_4 e^{-i(\beta+k)(b-\ell)}$$

$$i(\alpha - k)C_1 e^{i(\alpha-k)b} - i(\alpha + k)C_2 e^{-i(\alpha+k)b} = i(\beta - k)C_3 e^{i(\beta-k)(b-\ell)} - i(\beta + k)C_4 e^{-i(\beta+k)(b-\ell)}$$

que podemos escribir de forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \alpha & -\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i(\alpha-k)b} & e^{-i(\alpha+k)b} & -e^{i(\beta-k)(b-\ell)} & -e^{-i(\beta+k)(b-\ell)} \\ (\alpha - k)e^{i(\alpha-k)b} & -(\alpha + k)e^{-i(\alpha+k)b} & -(\beta - k)e^{i(\beta-k)(b-\ell)} & (\beta + k)e^{-i(\beta+k)(b-\ell)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = 0$$

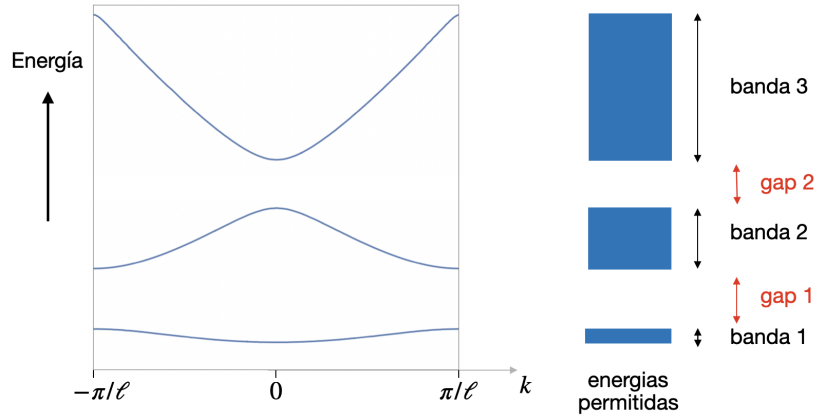
Este problema tiene una solución trivial $C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = 0$ lo que no es muy interesante. Para tener una solución no trivial, el determinante de la matriz debe ser nulo

$$e^{ik\ell - 2ibk} \left(8\alpha\beta [\cos(k\ell) - \cos(b\alpha) \cos(\beta(b - \ell))] - 4(\alpha^2 + \beta^2) \sin(b\alpha) \sin(\beta(b - \ell)) \right) = 0$$

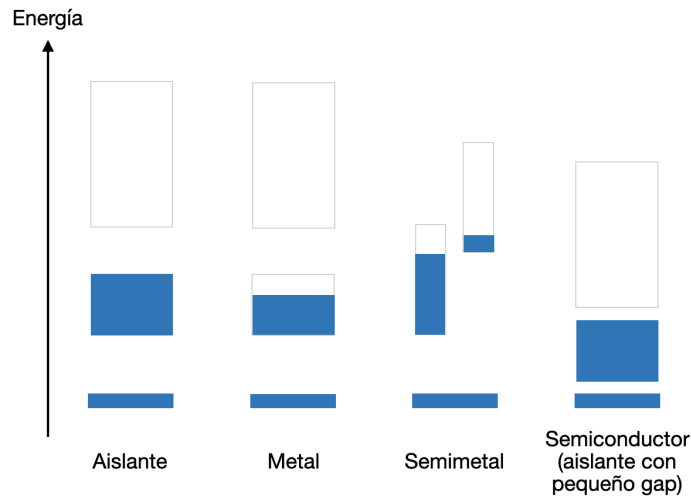
es decir

$$\cos(\alpha b) \cos(\beta(b - \ell)) + \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha b) \sin(\beta(b - \ell)) = \cos(k\ell) \quad (5.66)$$

Como b, ℓ, V_0 son parámetros del problema y (α, β) dependen de E , podemos obtener la relación $E = f(k)$, es decir la energía cuantizada según el parámetro k .



Primero, observamos que podemos estudiar solamente la región $k\ell \in [-\pi, \pi]$ ya que las energías son periódicas. Se llama la zona de Brillouin. Segundo, las energías no son discretas pero aparecen con bandas permitidas separadas por bandas prohibidas (gap). Según la estructura de bandas, podemos clasificar los diferentes materiales



Para un aislante o un semiconductor, a temperatura nula, existe una banda totalmente llena llamada banda de valencia y una banda vacía (banda de conducción) separadas por un gap. Para los semiconductores, el gap es más pequeño de tal forma que a $T \neq 0$, los electrones pueden pasar en la banda siguiente. Si a $T = 0$, la banda de valencia no es totalmente llena, no tenemos corriente, pero existen estados disponible muy cercanos y por lo tanto podemos fácilmente tener una corriente. En este caso, un campo eléctrico aunque pequeño hace que algunos electrones se mueven y por lo tanto hay corriente, es un metal.

5.5 El átomo de hidrógeno

Para estudiar el átomo de hidrógeno, debemos estudiar la ecuación de Schrödinger en 3 dimensiones

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi = E\Psi \quad (5.67)$$

Este átomo está compuesto de 2 cuerpos, un protón y un electrón. Es por lo tanto, un problema de 2 cuerpos que de forma similar a la mecánica clásica, puede ser reducido a un problema de un cuerpo con masa reducida $\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \simeq m_e$ y con centro de masa que corresponde aproximadamente al centro del protón. Como el potencial depende solamente de r es decir $V \equiv V(r)$ usaremos coordenadas esféricas. El laplaciano se escribe

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (5.68)$$

La parte angular tiene que ver con el momento angular pero no lo vamos a demostrar, usaremos solamente la notación

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}, \quad \text{con } L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger se escribe

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi + \frac{L^2}{2mr^2} \Psi + V(r)\Psi = E\Psi \quad (5.69)$$

o de forma equivalente

$$\frac{L^2}{\hbar^2} \Psi = r^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E)\Psi \quad (5.70)$$

Observamos que en la parte izquierda, tenemos solamente derivadas angulares aunque en la parte derecha, son derivadas con respecto a la variable radial. Esta forma nos indica que podemos usar el método de separación de variables, es decir podemos buscar una solución de la forma siguiente

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (5.71)$$

Reemplazando en la ecuación de Schrödinger, obtenemos

$$\underbrace{\frac{1}{\hbar^2 Y} L^2 Y}_{\text{depende solamente de } \theta, \phi} = \underbrace{\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E)}_{\text{depende solamente de } r} \quad (5.72)$$

La única solución es que la parte izquierda y derecha sean constantes, es decir

$$\frac{1}{\hbar^2 Y} L^2 Y = A \quad (5.73)$$

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = A \quad (5.74)$$

con A la constante.

Estas 2 ecuaciones son independientes y por lo tanto se pueden estudiar de forma independiente. Estudiaremos primero la ecuación angular (5.73)

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + A \right] Y(\theta, \phi) = 0 \quad (5.75)$$

De forma similar a la etapa previa, reescribimos la ecuación de la forma siguiente

$$\sin^2 \theta \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + A \right) Y(\theta, \phi) = - \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi) \quad (5.76)$$

La forma de la ecuación nos invita de nuevo a buscar una solución usando la separación de variables

$$Y(\theta, \phi) = P(\theta)g(\phi) \quad (5.77)$$

Reemplazando en la ecuación, obtenemos

$$\underbrace{\frac{\sin^2 \theta}{P(\theta)} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \right) P(\theta) + A \sin^2 \theta}_{\text{depende solamente de } \theta} = \underbrace{- \frac{1}{g(\phi)} \frac{d^2 g}{d\phi^2}}_{\text{depende solamente de } \phi} \quad (5.78)$$

Por lo tanto, ambos lados deben ser constante

$$- \frac{1}{g(\phi)} \frac{d^2 g}{d\phi^2} = B \quad (5.79)$$

$$\frac{\sin^2 \theta}{P(\theta)} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \right) P(\theta) + A \sin^2 \theta = B \quad (5.80)$$

con B la nueva constante.

La primera ecuación (5.79) es trivial, cuya solución es

$$g(\phi) = \alpha e^{i\sqrt{B}\phi} + \beta e^{-i\sqrt{B}\phi} \quad (5.81)$$

Pero la función debe ser periódica, es decir $g(0) = g(2\pi)$ y $g'(0) = g'(2\pi)$

La única solución es tener $B = m^2$ con m un entero es decir

$$g(\phi) = \alpha e^{im\phi} + \beta e^{-im\phi} \quad (5.82)$$

Al final nuestra solución tendrá la forma

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \alpha e^{im\phi} R(r)P(\theta) + \beta e^{-im\phi} R(r)P(\theta) \quad (5.83)$$

m se llama el numero cuántico magnético.

Continuando la resolución, podemos ahora resolver la ec.(5.80), tenemos

$$\frac{\sin^2 \theta}{P(\theta)} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \right) P(\theta) + A \sin^2 \theta = B \equiv m^2 \quad (5.84)$$

es decir

$$\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \right) P(\theta) + AP(\theta) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} P(\theta) = 0 \quad (5.85)$$

Como $\theta \in [0, \pi]$ es decir que $\cos \theta$ esta monovaluado, podemos definir $x = \cos \theta$ con $x \in [-1, 1]$. Haciendo este cambio de variables, obtenemos

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta} \frac{d}{dx} = -\sin \theta \frac{d}{dx} \quad (5.86)$$

$$\frac{d^2}{d\theta^2} = -\cos \theta \frac{d}{dx} + \sin^2 \theta \frac{d^2}{dx^2} \quad (5.87)$$

lo que transforma nuestra ecuación (5.85)

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) P'(x) \right) + AP(x) - \frac{m^2}{1-x^2} P(x) = 0 \quad (5.88)$$

El caso $m \neq 0$ puede ser deducido de la solución para $m = 0$. Por lo tanto, comenzaremos con el caso $m = 0$. Buscamos una solución en serie

$$P(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad (5.89)$$

lo que implica

$$P'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot a_n x^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n x^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) a_{n+1} x^n \quad (5.90)$$

$$P''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) a_n x^{n-2} = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n x^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} x^n \quad (5.91)$$

reemplazando en la ec.(5.85), obtenemos

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left((n+2)(n+1)a_{n+2} - (n+1)na_n + Aa_n \right) x^n = 0 \quad \forall x \quad (5.92)$$

Como debe ser nulo para todos los valores de x , deducimos que los coeficientes son nulos, lo que implica la relación de recurrencia siguiente

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - A}{(n+1)(n+2)} a_n \quad (5.93)$$

Pero cuando $n \gg 1$ $a_{n+2} \simeq a_n$ es decir que tendremos $P(x=1) = \sum_n a_n$ con coeficientes a_n, a_{n+1}, a_{n+2} iguales, es decir una suma que diverge. Para no tener una divergencia, ya que buscamos una solución física, debemos cortar la serie.

Por lo tanto, debemos tener un entero ℓ a partir de lo cual $a_{\ell+2} = 0$. De hecho si $a_{\ell+2} = 0$ tendremos $a_{\ell+4} = 0 \dots$ y de forma adicional podremos elegir que todos los términos $a_{\ell+1} = a_{\ell+3} = a_{\ell+5} = \dots = 0$, lo que significa que todos los términos superiores son nulos. Por lo tanto, tendremos

$$P(x) = \sum_{n=0}^{\ell} a_n x^n \quad (5.94)$$

es decir un polinomio y por lo tanto sin divergencia.

Como

$$a_{\ell+2} = \frac{\ell(\ell+1) - A}{(\ell+1)(\ell+2)} = 0 \quad (5.95)$$

obtenemos

$$A = \ell(\ell+1), \quad \text{con } \ell \text{ entero} \quad (5.96)$$

Es decir que A es también cuantizado

$$A = 0, 2, 6, 12, 20, \dots \quad (5.97)$$

para tener una solución sin divergencias.

Consideramos un ejemplo, si $\ell = 3$, es decir $A = 12$. Como $a_{n+2} = \frac{n(n+1)-12}{(n+1)(n+2)} a_n$, tenemos

$$\begin{aligned} n=0, & \quad a_2 = -6a_0 \\ n=1, & \quad a_3 = -\frac{5}{3}a_1 \\ n=2, & \quad a_4 = -\frac{1}{2}a_2 = 3a_0 \\ n=3, & \quad a_5 = 0 \\ n=4, & \quad a_6 = \frac{4}{15}a_4 = \frac{4}{5}a_0 \\ n=5, & \quad a_7 = \frac{3}{7}a_5 = 0 \end{aligned}$$

Los términos pares continúan hasta el infinito y por lo tanto producen una divergencia, hay que eliminarlos considerando $a_0 = 0$. Por otro lado, los términos impares son finito, es decir que forman un polinomio. En conclusión, tenemos

$$P_{\ell=3}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = a_1 x + a_3 x^3 = -\frac{a_1}{3} (5x^3 - 3x)$$

con a_1 una constante que se fija por normalización. Tradicionalmente, se fija con la condición

$$P_{\ell}(x = 1) = 1 \tag{5.98}$$

lo que para nosotros corresponde a

$$a_1 = -\frac{3}{2} \tag{5.99}$$

y por lo tanto

$$P_3(x) = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x) \tag{5.100}$$

o regresando a la variable original con $x = \cos \theta$

$$P_3(\theta) = \frac{1}{2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \tag{5.101}$$

De la misma forma, podemos obtener todas las soluciones. Se llaman los polinomios de Legendre. Tenemos por ejemplo,

$$P_0(x) = 1 \tag{5.102}$$

$$P_1(x) = x \tag{5.103}$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1) \tag{5.104}$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x) \tag{5.105}$$

Es fácil demostrar que estos polinomios pueden ser escritos de forma genérica

$$P_{\ell}(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} (x^2 - 1)^{\ell} \tag{5.106}$$

Se llama la fórmula de Rodrigues.

Para $m \neq 0$, la estructura es muy parecida y podemos resolver la ecuación (5.85) de forma similar pero la ecuación lleva un término $(m/(1-x^2))$ que diverge en $x = \pm 1$,

por lo tanto no se puede usar una expansión en serie. Para eliminar esta divergencia, hacemos el cambio de variable

$$P(x) = (x^2 - 1)^{m/2} f(x) \quad (5.107)$$

para llegar a la ecuación

$$(1 - x^2) f''(x) - 2(m + 1)x f'(x) + [A - m(m + 1)]f(x) = 0 \quad (5.108)$$

que se puede estudiar de forma similar al caso previo. Haciendo el mismo desarrollo, encontraremos que

$$A = \ell(\ell + 1), \text{ con } \ell \in \mathbb{N} \quad (5.109)$$

La solución final se puede escribir de forma similar a la fórmula de Rodrigues (5.106)

$$P_\ell^m(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2 - 1)^\ell \quad (5.110)$$

llamados polinomios asociados de Legendre.

Por ejemplo para $\ell = 1$ y $m = 1$, tenemos

$$P_1^1(x) = \sqrt{1 - x^2} \quad (5.111)$$

es decir

$$P_1^1(\theta) = \sin \theta \quad (5.112)$$

Se observa de la fórmula (5.110) que debemos considerar la condición $m + \ell \geq 0$ es decir $m \geq -\ell$. También se puede observar que si el polinomio $(x^2 - 1)^\ell$ esta derivado más de 2ℓ veces, obtenemos un polinomio nulo. Por lo tanto, debemos considerar la condición $m + \ell \leq 2\ell$ es decir $m \leq \ell$. En conclusión, conocemos la solución por la parte angular de la ecuación de Schrödinger (5.76)

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = \alpha P_\ell^m(\theta) e^{im\phi}, \text{ con } -\ell \leq m \leq \ell \quad (5.113)$$

donde α es una constante de normalización. Estas funciones se llaman los armónicos esféricos con 2 numeros enteros llamados el numero cuántico azimutal para ℓ y el el numero cuántico magnético para m . Usualmente $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ se normaliza de tal forma que

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_\ell^m(\theta, \phi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (5.114)$$

lo que nos da

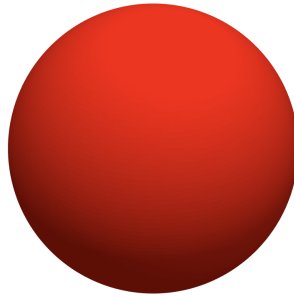
$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(\ell - m)!}{4\pi(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (5.115)$$

con los polinomios asociados de Legendre dado por (5.110) y con la condición

$$-\ell \leq m \leq \ell \quad (5.116)$$

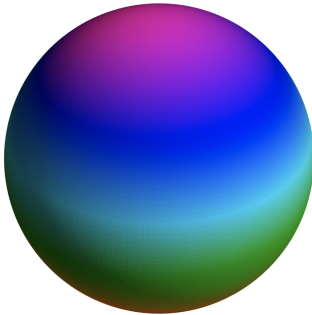
Como nunca hemos elegido el potencial $V(r)$, la solución de la parte angular de la ecuación de Schrödinger es siempre de esta forma para potenciales que no dependen de los ángulos.

Para ganar un poco de intuición con respecto a estas funciones, podemos representar los armónicos esféricos sobre una esfera de radio 1, con color según el valor de esta función en un cierto valor de θ y ϕ . Excepto para $m = 0$, estas funciones son complejas y por lo tanto se debe representar la parte real y la parte imaginaria. Nos enfocaremos solamente con los casos $m \geq 0$ ya que para m negativo, la parte imaginaria cambiara de signo y por lo tanto de color. Para el caso $\ell = m = 0$, tenemos $Y_0^0(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$, por lo tanto la función tiene el mismo color para cualquier ángulo

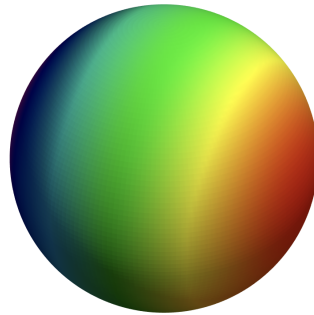


$\ell = m = 0$

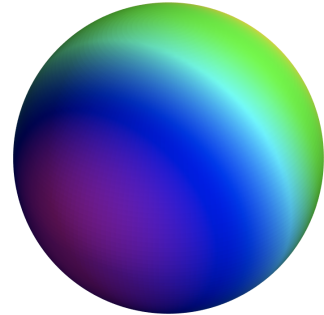
En el caso $\ell = 1$, tenemos



$m = 0$

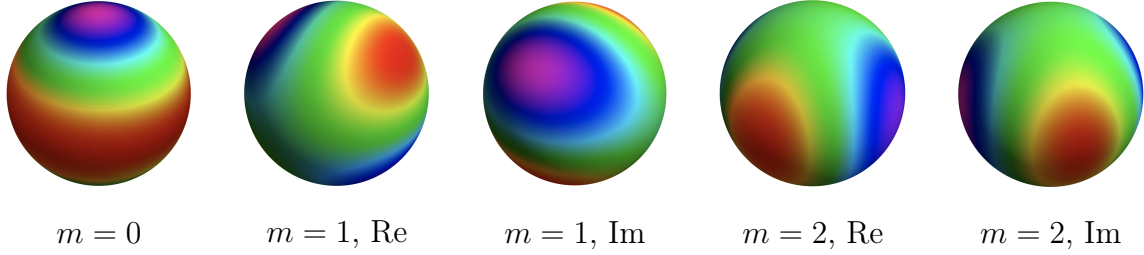


Parte real con $m = 1$



Parte imaginaria con $m = 1$

En el caso $\ell = 2$, tenemos



Podemos pasar ahora a la resolución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger (5.74)

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = A, \text{ con } A = \ell(\ell + 1) \quad (5.117)$$

Hacemos el cambio de variable $u(r) = rR(r)$, para obtener

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + \left(V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right) u(r) = Eu(r) \quad (5.118)$$

Lo que corresponde a la ecuación de Schrödinger en una dimensión con un potencial efectivo

$$V_{\text{ef}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \quad (5.119)$$

Para el átomo de hidrógeno, el potencial $V(r)$ corresponde a la interacción entre un protón y un electrón

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (5.120)$$

En la ecuación de Schrödinger, hemos considerado el núcleo como el centro con una sola otra partícula presente, el electrón. Por eso, aparece la masa, m del electrón aunque en realidad, debería ser la masa reducida μ . Pero como $m_{\text{proton}} \gg m_e$ tenemos $\mu \approx m_e$. Para simplificar las notaciones, redefinimos algunas variables. Se define la nueva coordenada $x = r/a_0$ con a_0 el radio de Bohr

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \quad (5.121)$$

y también definimos

$$\lambda = \sqrt{-\frac{E}{E_1}}, \quad \text{con } E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \quad (5.122)$$

donde hemos definido E_1 la energía de ionización del átomo de hidrógeno (3.8)

$$u''(x) + \left(\frac{2}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} - \lambda^2 \right) u(x) = 0 \quad (5.123)$$

Estas ecuaciones se estudian siempre de forma similar. Primero estudiamos el comportamiento de la ecuación en los puntos problemáticos lo que corresponde en este caso a $x = 0$ y $x = \infty$. Cuando $x \rightarrow 0$ la ecuación se aproxima a

$$u''(x) - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} u(x) = 0 \quad (5.124)$$

cuyas soluciones son de la forma $u(x) = x^p$. Reemplazando en la ecuación obtenemos

$$p(p-1) - \ell(\ell+1) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad p = \begin{cases} \ell+1 \\ -\ell \end{cases} \quad (5.125)$$

es decir que la solución alrededor de $x = 0$ es

$$u(x) = \alpha x^{\ell+1} + \frac{\beta}{x^\ell} \quad (5.126)$$

pero como $\ell \geq 0$, la segunda solución diverge y por lo tanto debemos considerar que

$$u(x) = \alpha x^{\ell+1} \quad (5.127)$$

alrededor de $x = 0$. Cuando $x \rightarrow \infty$, obtenemos

$$u''(x) - \lambda^2 u(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad u(x) = Ae^{\lambda x} + Be^{-\lambda x} \quad (5.128)$$

Pero como la función $e^{\lambda x}$ diverge al infinito, debemos considerar que al infinito la solución es de la forma

$$u(x) = Be^{-\lambda x} \quad (5.129)$$

Estos dos comportamientos deben ser factorizado para regularizar la ecuación. Por lo tanto definimos

$$u(x) = x^{\ell+1} e^{-\lambda x} q(x) \quad (5.130)$$

la ecuación (5.123) se reescribe

$$q''(x) + \left(\frac{2(\ell+1)}{x} - 2\lambda \right) q'(x) - \frac{2}{x} (\lambda(\ell+1) - 1) q(x) = 0 \quad (5.131)$$

Buscamos una solución que se puede expandir en serie ya que es una ecuación regularizada

$$q(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \quad (5.132)$$

Reemplazando en la ecuación, obtenemos la relación de recurrencia

$$\frac{a_k}{a_{k-1}} = \frac{2(\lambda(k + \ell) - 1)}{k(k + 2\ell + 1)}, \quad \text{con } k \geq 1 \quad (5.133)$$

De forma similar a los polinomios de Legendre, podemos observar que para $k \gg 1$

$$\frac{a_k}{a_{k-1}} \simeq \frac{2\lambda}{k} \Rightarrow a_k \simeq \frac{(2\lambda)^k}{k!} \Rightarrow q(x) \simeq e^{2\lambda x} \quad (5.134)$$

En este caso, obtenemos para la función u (5.130)

$$u(x) \simeq x^{\ell+1} e^{-\lambda x} e^{2\lambda x} \simeq x^{\ell+1} e^{+\lambda x} \quad (5.135)$$

lo que diverge al infinito. De forma similar a los polinomios de Legendre, entendemos que la función u siempre diverge si la serie es infinita, por esa razón debemos cortar la serie en un polinomio, es decir asumir que existe un k tal que $a_k = 0$ lo que corresponde a (5.134)

$$\lambda(k + \ell) - 1 = 0 \quad (5.136)$$

es decir

$$\lambda = \frac{1}{k + \ell} \equiv \frac{1}{n} \quad (5.137)$$

con n un entero positivo llamado el número cuántico principal. Pero con la condición $k \geq 1$ y $k + \ell = n$ obtenemos

$$\ell \leq n - 1 \quad (5.138)$$

Como $\lambda = \sqrt{-E/E_1}$ obtenemos que la energía es cuantizada

$$E = -\frac{E_1}{n^2} \quad (5.139)$$

resultado ya obtenido por Bohr (3.8).

El polinomio $u(x)$ se define con la relación de recurrencia (5.133)

$$a_k = 2 \frac{\lambda(k + \ell) - 1}{k(k + 2\ell + 1)} a_{k-1} \quad (5.140)$$

conocidos como los polinomios asociados de Laguerre.

Los polinomios de Laguerre son solución de una ecuación parecida

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} + \left(\frac{\alpha + 1}{y} - 1 \right) \frac{d}{dy} + \frac{m}{y} \right) L_m^{(\alpha)}(y) = 0 \quad (5.141)$$

aunque nuestra ecuación es de la forma

$$q''(x) + \left(\frac{2(\ell + 1)}{x} - 2\lambda \right) q'(x) - \frac{2}{x}(\lambda(\ell + 1) - 1)q(x) = 0 \quad (5.142)$$

con $\lambda = 1/n$ (5.137). Redefiniendo la variable $x = ny/2$ obtenemos

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} + \left(\frac{2(1 + \ell)}{y} - 1 \right) \frac{d}{dy} + \frac{n - 1 - \ell}{y} \right) q(y) = 0 \quad (5.143)$$

lo que es parecido a la ec.(5.141) si $\alpha = 2\ell + 1$ y $m = n - \ell - 1$ es decir que nuestra solución se escribe con polinomios de Laguerre de la forma siguiente

$$q(x) = L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)} \left(\frac{2}{n}x \right) \quad (5.144)$$

Nota que estos polinomios pueden ser obtenidos por una formula de tipo Rodrigues

$$L_k^{(\alpha)}(x) = e^x \frac{x^{-\alpha}}{k!} \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^{k+\alpha}) \quad (5.145)$$

En conclusión, la solución final de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno es

$$\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) = N r^\ell e^{-r/na_0} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)} \left(\frac{2r}{na_0} \right) Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (5.146)$$

con N un factor de normalización, n el número cuántico principal, ℓ el número cuántico azimutal y m el número cuántico magnético

$$n \geq 1, \quad \ell \leq n - 1, \quad -\ell \leq m \leq \ell \quad (5.147)$$

La energía se caracteriza solamente por el número cuántico principal

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2} \quad (5.148)$$

es decir que 2 estados con el mismo n pero con (ℓ, m) diferente describen el mismo estado energético pero con configuraciones diferentes. Es la degenerancia del nivel n . Para cada nivel n , hay n posibles valores de ℓ ($0, 1, \dots, n - 1$) y para cada ℓ , hay

$2\ell + 1$ valores diferentes de m ($-\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$). Por lo tanto, el número total de funciones de ondas $\Psi_{n,\ell,m}$ es decir el número total de configuraciones para un n dado es

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2 \quad (5.149)$$

En consecuencia, solo el estado fundamental ($n = 1$) es no degenerado. Hay 2 orígenes a esta degeneración de los niveles $n > 1$.

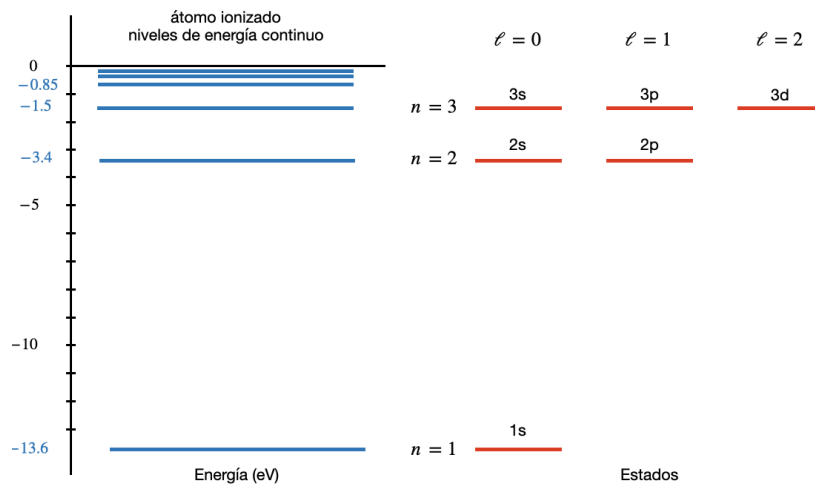
- No tenemos una dirección espacial preferida por la simetría esférica, lo que implica la degeneración en m , es decir asociada a ϕ . La introducción de un campo vectorial externo que fija una dirección privilegiada, rompe esta degeneración. Es el caso del átomo de hidrógeno en un campo magnético, llamado efecto Zeeman.
- El potencial de la forma $1/r$ produce la degeneración en ℓ . Cualquier corrección al potencial rompe esta degeneración. Lo que ocurre cuando tenemos muchos electrones o correcciones relativistas.

Nota que en la espectroscopia, la notación es diferente. A cada valor de ℓ se asocia una letra:

- $\ell = 0$ se llama orbital s
- $\ell = 1$ se llama orbital p
- $\ell = 2$ se llama orbital d
- $\ell = 3$ se llama orbital f

y luego continuamos con el orden alfabético g, h, i, \dots

El estado fundamental $n = 1, \ell = 0, m = 0$ se denota $1s$, aunque para $n = 2$, tenemos las orbitales $2s$ y $2p$.



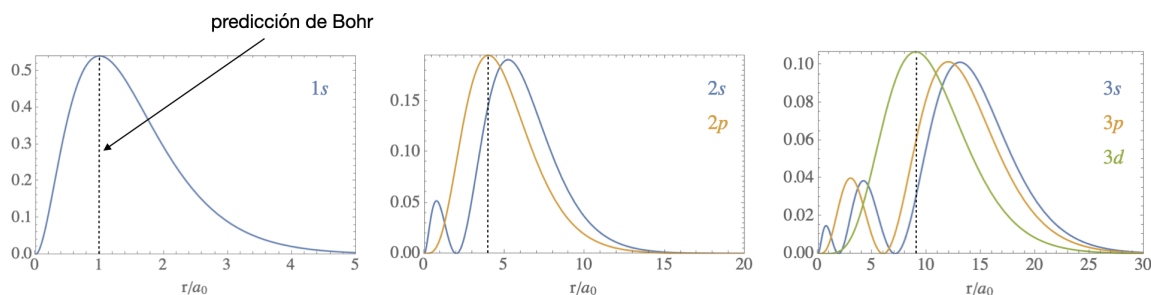
Para terminar este capítulo, podemos representar gráficamente la probabilidad de presencia de un electrón por cada orbital. Primero podemos tratar recubrir el resultado de Bohr. En este caso, debemos enfocarnos en la parte radial solamente, ya que el modelo de Bohr supone órbitas circulares. Recordando que la función de onda es normalizada de la forma siguiente

$$\iiint |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 1 \quad (5.150)$$

podemos definir la distribución de probabilidad de encontrar el electrón en algún radio por la función

$$\int \int |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\phi \quad (5.151)$$

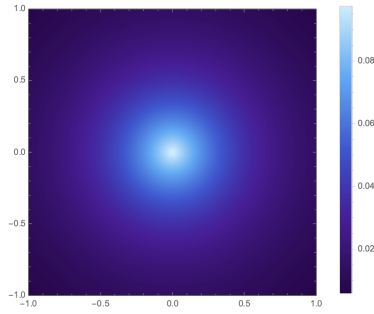
es decir que integramos sobre los ángulos.



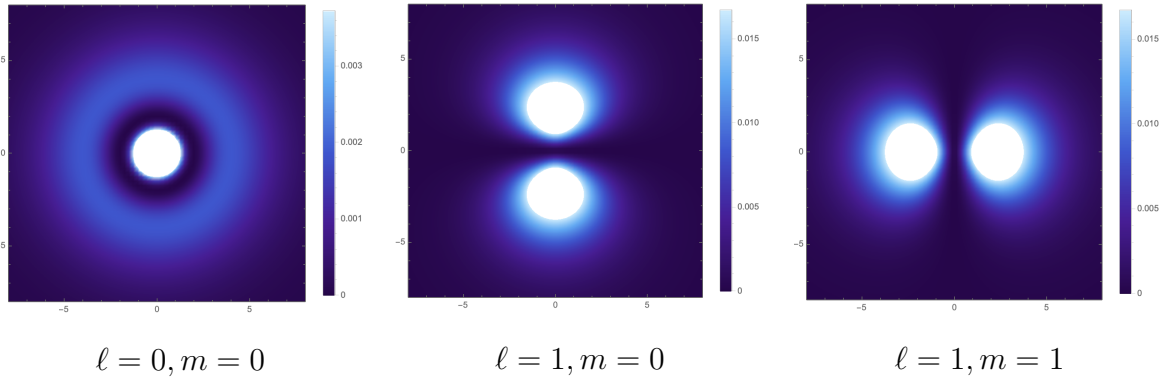
Observamos en este gráfico, la probabilidad radial de presencia del electrón. El máximo se encuentra aproximadamente alrededor del radio predicho por Bohr (3.7) $r = n^2 a_0$. Esta predicción es exacta cuando ℓ es máximo para un n dado. Como ℓ está relacionado al momento angular del electrón, la predicción de Bohr es buena cuando el momento angular es máximo es decir cuando la fuerza centrífuga es máxima⁶. En este caso, el electrón se encuentra más lejano, aunque para las otras orbitas, existe unos máximos adicionales mas cercanos al núcleo. En consecuencia, para momentos angulares mayor, el electrón se encuentra más localizado, ya que existe un solo máximo. Esta observación tiene consecuencia importante en las interacciones entre electrones en un material. Aunque el modelo de Bohr es muy simple, ofrece buenas predicciones del radio del átomo y de su energía. Obviamente, la mecánica cuántica predice una estructura más complicada que una partícula que se mueve sobre una órbita circular.

⁶En este caso, la órbita es circular en el modelo de Sommerfeld a diferencia de órbitas elípticas para un ℓ menor.

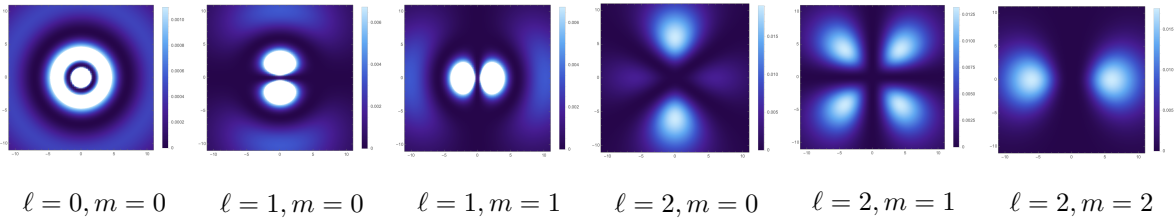
Podemos pasar ahora a la visión en 3 dimensiones. En este caso, estudiaremos la probabilidad de encontrar el electrón en un punto, es decir $|\Psi(r, \theta, \phi)|^2$. Como la dependencia en ϕ de la función de onda es $e^{im\phi}$, la norma $|\Psi(r, \theta, \phi)|^2$ depende solamente de (r, θ) . Podemos por lo tanto representar estas orbitales en un plano. Por ejemplo el plano $(x - z)$ sin preocuparnos de ϕ . En el caso del fundamental, $n = 1, \ell = 0$ y $m = 0$ obtenemos



La partícula se encuentra principalmente en el centro. Nota que los ejes están normalizado por el radio de Bohr a_0 . Para el caso $n = 2$, obtenemos



Se observa que para $\ell = 0$, de nuevo la probabilidad de encontrar el electrón es máxima en $r = 0$ pero aparece también un segundo anillo en el cual el electrón puede encontrarse, lo que es un poco parecido a las órbitas de Bohr. Pero para la orbital p , veamos que no es parecido a la visión de Bohr. Para $n = 3$, obtenemos



5.6 Sistema con muchos electrones

En el caso de estudiar un sistema con muchos electrones, el problema se convierte en algo muy difícil que puede ser resuelto numéricamente. Por ejemplo, para el átomo de helio, deberíamos resolver la ecuación

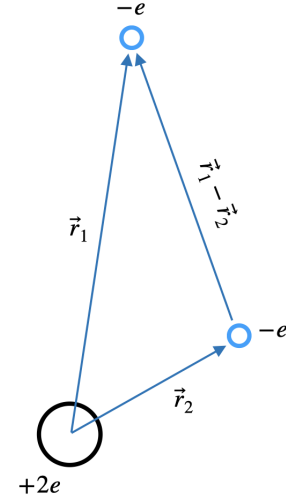
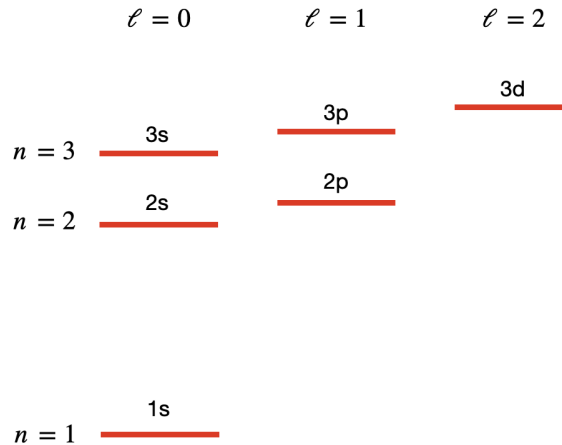
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1\Psi - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2\Psi + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(-\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\right)\Psi = E\Psi$$

donde aparecen 3 potenciales correspondiendo a las interacciones entre los 2 protones y el primer electron, el segundo electron y finalmente la interacción entre los 2 electrones. Los laplacianos representan las derivadas asociadas a las posiciones de los 2 electrones

$$\Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{2}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_1^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} + \frac{\cos \theta_1}{\sin \theta_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} + \frac{1}{\sin^2 \theta_1} \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} \right]$$

$$\Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{2}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{1}{r_2^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta_2^2} + \frac{\cos \theta_2}{\sin \theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} + \frac{1}{\sin^2 \theta_2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right]$$

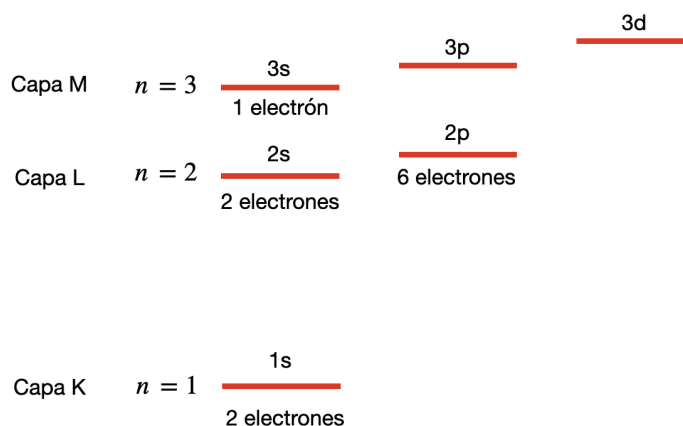
con (r_1, θ_1, ϕ_1) las coordenadas de un electrón y (r_2, θ_2, ϕ_2) las coordenadas del otro electrón. La situación es aún mas complicada para N electrones. Pero se puede resolver de forma numérica. La configuración energética final tiene la forma siguiente



exclusión de Pauli. Este principio nos dice que podemos tener hasta 2 electrones por estado (n, ℓ, m) . Cada sistema descrito por (n, ℓ) sin preocuparse de m tiene $2\ell + 1$ valores de m y por lo tanto podemos tener hasta $2(2\ell + 1)$ electrones en cada orbital (n, ℓ) . En conclusión

- Los estados ns como $1s, 2s, \dots$ pueden contener hasta 2 electrones
- Los estados np como $2p, 3p, \dots$ pueden contener hasta 6 electrones
- Los estados nd como $3d, 4d, \dots$ pueden contener hasta 10 electrones

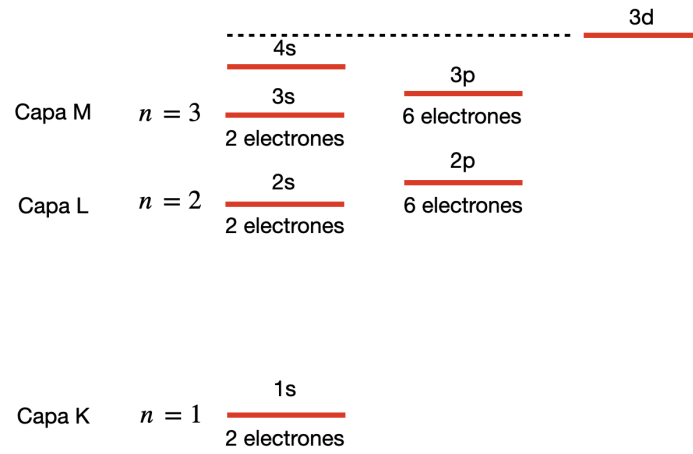
Los electrones comienzan a ocupar los estados de energía mas baja es decir que 2 electrones ocupan la orbital $1s$, luego los otros electrones ocupan el estado $2s$ con 2 electrones, luego tenemos 6 electrones que ocupan la orbita $2p \dots$ Es el modelo de capas. La capa poblada más externa, es decir con energía mas alta, se llama capa de valencia. Por ejemplo, el sodio tiene 11 electrones que se distribuyen de la siguiente forma



Tenemos 2 electrones sobre la capa K es decir $n = 1$, 8 electrones sobre la capa L y finalmente 1 electrón sobre la capa M . Se escribe

$$(K)^2(L)^8(M)^1$$

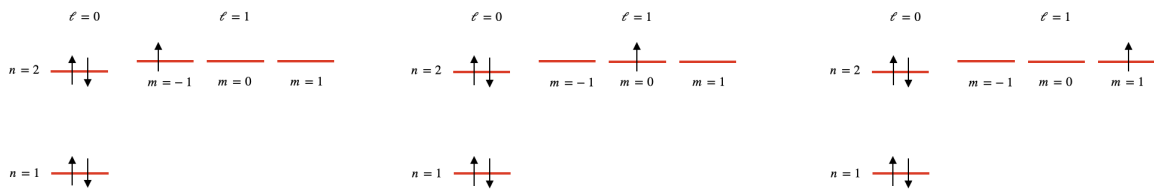
Las capas K y L son saturadas (llenas) mientras que el electrón de la capa M es solo y entonces "libre". Ese electrón puede tener interacciones con otros átomos. Por eso, el sodio podrá fácilmente perder este electrón y formar el catión sodio Na^+ . Los átomos que saturan una capa, son más estable. Tienen poca tendencia a participar en reacciones químicas. Se llaman los gases nobles. Por ejemplo el helio $(K)^2$ o el neón $(K)^2(L)^8$. También el argón $(K)^2(L)^8(M)^8$ es un gas noble aunque no satura toda la capa M con 10 electrones pero es estable porque $E_{4s} < E_{3d}$



6. El espín

Aunque el principio de exclusión de Pauli nos dice que no podemos tener 2 electrones en el mismo estado, hemos dicho en la sección previa que podemos tener, por ejemplo, 2 electrones en el estado $n = 1, \ell = 0, m = 0$ es decir en la órbita $1s$. La razón es que estos 2 electrones en la misma órbita no tienen todos los números cuánticos iguales, existe otro número cuántico que les diferencia. Las partículas como electrones, protones y neutrones poseen una propiedad intrínseca conocida como espín. El espín no es lo mismo que la rotación física o el giro en el sentido clásico. En cambio, es una característica fundamental de las partículas cuánticas que no tiene un análogo directo en la física clásica.

Como lo hemos visto, la energía y otras propiedades del átomo sólo pueden tomar valores discretos, conocidos como estados cuantizados. Para partículas como los electrones, el valor del espín es siempre $1/2$, pero puede tener dos orientaciones posibles cuando se mide: "espín arriba" denotado por \uparrow o "espín abajo", denotado como \downarrow . Por ejemplo, para boro con 5 electrones tenemos las posibilidades siguientes



No podríamos tener en la misma órbita, 2 electrones con la misma orientación de espín, esta es excluido por el principio de Pauli.

Para bien entender el descubrimiento del espín, tenemos que introducir un par de conceptos adicionales

6.1 Momento magnético

Una partícula cargada en movimiento produce un campo magnético. Es un resultado que podemos deducir de las ecuaciones de Maxwell (1.8)

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \quad (6.1)$$

Aunque despreciamos el campo eléctrico, obtenemos

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} \quad (6.2)$$

es decir que una corriente eléctrica \mathbf{J} produce un campo magnético. Este resultado era ya conocido por la ley de Biot y Savart

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3} \quad (6.3)$$

es decir que una partícula cargada q con velocidad \mathbf{v} produce un campo magnético \mathbf{B} . En particular, podemos enfocarnos en una corriente en un bucle cerrado. En este caso podemos definir un parámetro intermedio, llamado el momento magnético \mathbf{m} que produce el campo magnético

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3(\mathbf{m} \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{m}}{r^3}$$

con $\hat{\mathbf{r}}$ el vector unitario definido por

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r}$$

Este momento magnético esta definido por

$$\mathbf{m} = I\mathbf{A} \quad (6.4)$$

con \mathbf{A} la superficie del bucle con dirección ortogonal a la superficie y I la corriente. Pero sabemos que

$$I = \lambda v \quad (6.5)$$

con λ la densidad lineal de carga y v la velocidad de los electrones. Podemos escribir

$$\lambda = \frac{Q}{2\pi R} \quad (6.6)$$

con Q la carga total y R el radio del bucle, lo que implica

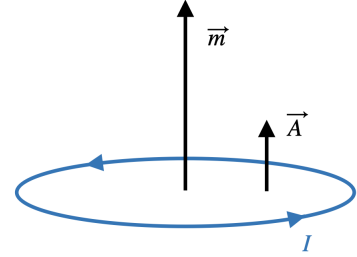
$$I = \frac{Q}{2\pi R} v \quad (6.7)$$

es decir

$$m = IA = \frac{Q}{2\pi R} v \pi R^2 = \frac{Q}{2} Rv \quad (6.8)$$

Pero el momento angular es

$$\mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (6.9)$$



es decir $L = mRv$, lo que nos permite escribir

$$m = \frac{Q}{2}RV = \frac{Q}{2m}L \quad (6.10)$$

pero como \mathbf{L} y \mathbf{m} tienen la misma dirección, obtenemos

$$\mathbf{m} = \frac{Q}{2m}\mathbf{L} \quad (6.11)$$

Es una fórmula interesante porque no depende de parámetros como R, V, \dots pero de parámetros universales como Q, m . En conclusión, observamos que el movimiento de un electrón en una órbita o de forma equivalente un electrón con momento angular produce un momento magnético y por lo tanto un campo magnético. Podemos imaginar un segundo origen al campo magnético. Una rotación del electrón sobre sí mismo. Este movimiento asociado a otro momento angular debería también producir un campo magnético. Para no confundir el momento angular en la órbita y el momento angular del movimiento sobre sí mismo, llamaremos este segundo momento angular \mathbf{S} en vez de \mathbf{L} . Por lo tanto deberíamos tener un segundo momento magnético producido por este segundo momento magnético, notaremos el segundo momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ para no confundirlo con \mathbf{m}

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{Q}{2m}\mathbf{S} \quad (6.12)$$

Para un electrón $Q = -e$

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m}\mathbf{S} = -\frac{e\hbar}{2m\hbar}\mathbf{S} \equiv -\mu_B\frac{\mathbf{S}}{\hbar} \quad (6.13)$$

donde se ha introducido una nueva constante, el magnetón de Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (6.14)$$

Este segundo campo magnético está observado, así que \mathbf{S} existe y se llama el momento magnético intrínseco o espín. Desafortunadamente nuestra visión clásica es incorrecta. Aunque el vector \mathbf{S} existe, no está asociado a una carga girando sobre sí mismo. Primero porque partículas sin carga tienen un espín como el neutrón, segundo porque la fórmula (6.13) es incorrecta, debe ser

$$\boldsymbol{\mu} = g\mu_B\frac{\mathbf{S}}{\hbar} \quad (6.15)$$

con $g = -2.00231930436118$ en vez de $g = -1$ como lo hemos obtenido usando la mecánica clásica. El valor de g (factor de Landé) está predicho por la mecánica cuántica

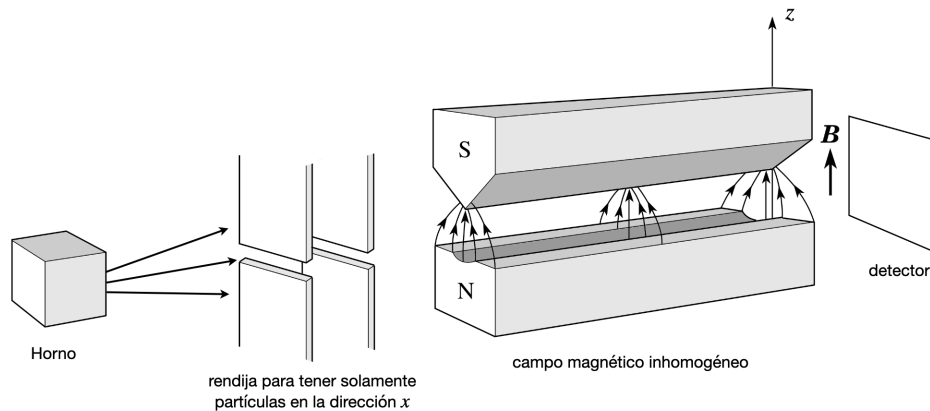
o teoría cuántica de campos y coincide con el valor medido experimentalmente con una precisión de alrededor de 1 parte entre 1 billón (10^{12}), lo que convierte al momento magnético del electrón en una de las predicciones verificadas con mayor precisión de la historia de la física.

$$g_{\text{teórico}} = -2.00231930436328$$

$$g_{\text{experimental}} = -2.00231930436118$$

6.2 Experimento de Stern y Gerlach

Realizado por Otto Stern y Walther Gerlach en 1922, el experimento proporcionó pruebas directas de que partículas como los electrones tienen un momento angular intrínseco (espín) que sólo puede tomar valores discretos cuando se mide.

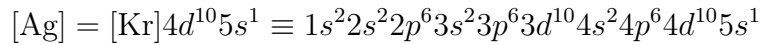


En el experimento se utilizó un haz de átomos de plata. Estos átomos se calientan en un horno para formar un haz gaseoso que pasa a través de una pequeña rendija, de modo que se forma una fina corriente de átomos que se mueven en línea recta. La parte clave del experimento es la aplicación de un campo magnético no uniforme. Este campo se produce colocando dos imanes con sus polos formados de tal manera que el campo magnético varía en intensidad a través del espacio. Uno de los imanes tiene un borde afilado, lo que crea un gradiente en el campo magnético. En consecuencia, el campo magnético ejerce una fuerza sobre los átomos en función de su momento magnético

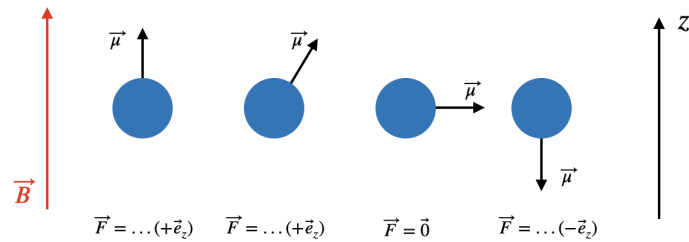
$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) \quad (6.16)$$

Si se había considerando un campo magnético constante, la fuerza habría sido nula. También se eligieron los átomos de plata porque su capa exterior tiene un único electrón no apareado, y por lo tanto podemos medir el efecto de este electrón. De hecho plata

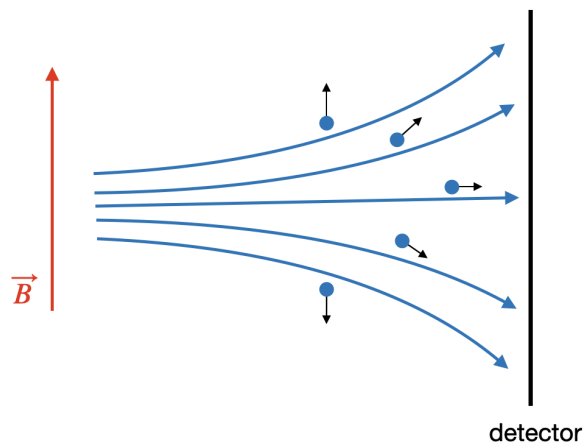
tiene 47 electrones con estructura electrónica



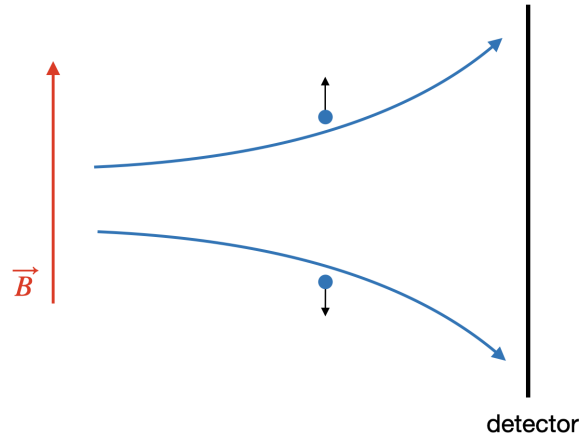
Los 46 electrones no participan mucho al experimento. Participa principalmente el electrón de valencia, es decir el electrón externo. Por lo tanto, el experimento es equivalente a un haz de electrones y por lo tanto nos permite estudiar el momento μ del electrón.



Según la ecuación (6.16), la fuerza cambia según la orientación del espín en comparación con el campo magnético externo. Por lo tanto los átomos deberían encontrarse desviado de diferentes maneras. Por ejemplo, cuando el espín está ortogonal al campo magnético externo, la fuerza es nula y por lo tanto la partícula no se encuentra desviada.



Pero Stern y Gerlach observaron partículas en 2 lugares solamente, lo que implica que los electrones tienen solamente 2 direcciones de espín.



Este experimento a permitido calcular la proyección del espín \mathbf{S} en la dirección z

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Es decir que tenemos una cuantización del espín. Obviamente la dirección z no tiene ningún rol particular. Por lo tanto, si se hace el experimento en la dirección x o y , tendremos exactamente el mismo resultado, es decir que se medirá una proyección del espín tal que

$$S_x = \pm \frac{\hbar}{2}, \quad S_y = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Por lo tanto, el espín no es realmente un vector en el sentido clásico, está descrito por algo llamado un espinor⁷. En resumen, el electrón tienen un espín 1/2, es una propiedad fundamental de la partícula como su carga o su masa, además su estado cuántico se encuentra en una superposición de proyecciones de espín. Cuando se hace un experimento, nos encontramos de forma aleatoria con una proyección de espín hacia arriba o hacia abajo, $\pm\hbar/2$. En resumen el estado del electrón será descrito por una función

$$\Psi(\mathbf{r})\chi_S \tag{6.17}$$

con $\Psi(\mathbf{r})$ la función de onda solución de la ecuación de Schrödinger y χ_S la función que describe el estado del espín, es decir si el espín es hacia arriba o abajo.

De forma genérica, todas las partículas tienen un espín y este espín puede tener diferentes proyecciones. Se clasifica las partículas según si tienen un espín entero como

⁷Es un tipo de vector complejo con 2 componentes y que se transforma de forma distinta a un vector cuando hacemos una rotación. El espinor gana un signo menos cuando se hace una rotación de 360°.

bosones o espín semi-entero como fermiones. Los electrones son fermiones. Existe en el modelo estándar partículas con

- Espín $S = 0$, en ese caso $S_x = S_y = S_z = 0$. Una sola partícula existe sin espín, el boson de Englert-Brout-Higgs
- Espín $S = 1/2$, en ese caso $S_x = S_y = S_z = \pm\hbar/2$, son fermiones como el electrón, protón, neutrón \dots
- Espín $S = 1$, en ese caso $S_x = S_y = S_z = \{-\hbar, 0, \hbar\}$, son bosones como el fotón, gluones, bosón W o Z ⁸

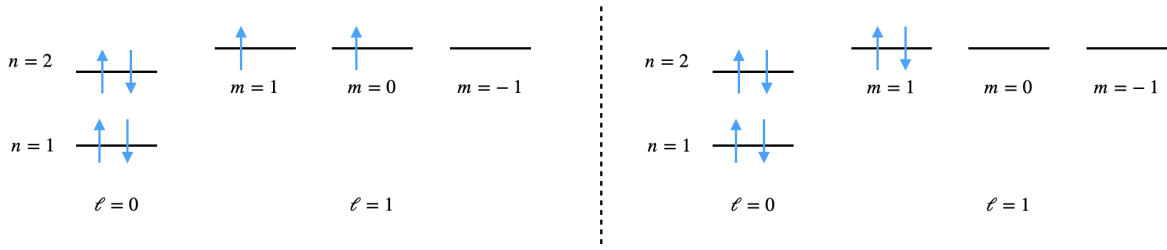
Existen también predicciones que no han sido observadas como partículas de

- Espín $S = 3/2$, en ese caso $S_x = S_y = S_z = \{-3\hbar/2, -\hbar/2, 0, \hbar/2, 3\hbar/2\}$. Son fermiones como por ejemplo el gravitino.
- Espín $S = 2$, en ese caso $S_x = S_y = S_z = \{-2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar\}$. El único probablemente con este valor de espín es el gravitón y como no tiene masa tendrá solamente 2 proyecciones de espín $S_x = S_y = S_z = \{-2\hbar, 2\hbar\}$.

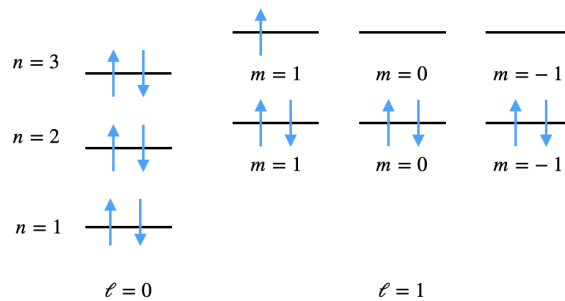
6.3 Magnetismo

Como lo hemos visto, el momento angular de las partículas y en particular de los electrones produce un campo magnético, pero también el espín. Ambos contribuyen al magnetismo. Por lo tanto, los electrones llevan un momento magnético permanente μ producido por \mathbf{L} y \mathbf{S} . Estos momentos, μ , están orientados de forma aleatoria. Pero bajo un campo magnético externo, se orientan en la misma dirección. Este fenómeno ocurre en particular para átomos que tienen electrones desapareados, como el carbono, de acuerdo con la regla de Hund. Esta regla nos indica cómo llenar las capas electrónicas con electrones. En particular, nos indica que para una capa dada, por ejemplo de tipo p , que puede recibir 6 electrones, se llenan primero los orbitales con espines orientados en la misma dirección antes de sumar electrones con espín opuesto. Esta regla es el resultado del principio de exclusión de Pauli. De hecho, 2 partículas en el mismo orbital con el mismo espín deben encontrarse alejadas, lo que reduce la energía de repulsión entre los 2 electrones y favorece esta configuración en comparación con 2 electrones con espín opuesto, que pueden encontrarse más cercanos, aumentando la energía de repulsión coulombiana. Es decir que para el carbono $1s^2 2s^2 2p^2$, la configuración de izquierda es favorecida en comparación con la configuración de la parte derecha

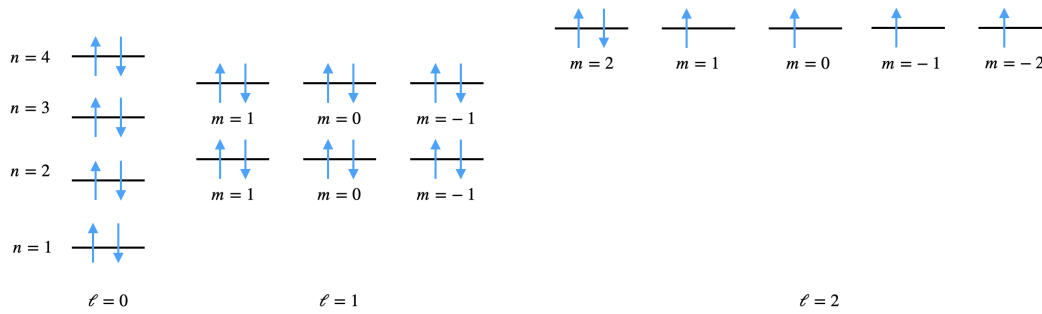
⁸El fotón tiene dos proyecciones de espín y no tres $S_x = S_y = S_z = \{-\hbar, \hbar\}$



En particular, la configuración de la parte izquierda tiene un espín total de $s = 1 = 1/2 + 1/2$ aunque la parte derecha tiene un espín total de $s = 0 = 1/2 - 1/2$. Por esa razón, el tipo de material produce efectos magnéticos distintos. Hablamos en este caso de paramagnetismo, es decir que el espín de estos electrones pueden orientarse en la misma dirección que el campo magnético externo y producir un magnetismo. Pero esta orientación de estos momentos magnéticos desaparece una vez el campo magnético externo apagado. Algunos materiales, llamados ferromagnéticos, pueden tener una magnetización permanente en ausencia de un campo magnético externo, como el hierro, cobalto, níquel. En estos materiales, ferromagnéticos, existen interacciones entre los momentos magnéticos de los diferentes átomos que son mas fuertes y por lo tanto quedan orientado en la misma dirección. Por ejemplo, en el caso del aluminio, tenemos una configuración $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$



En este caso el momento angular es $\ell = 1$ y el espín total es $1/2$ lo que produce un momento magnético débil y por lo tanto que interactúa débilmente con los electrones cercanos. Por otro lado, el hierro tiene una configuración $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ ya que la capa $4s$ tiene una energía más baja que la capa $3d$



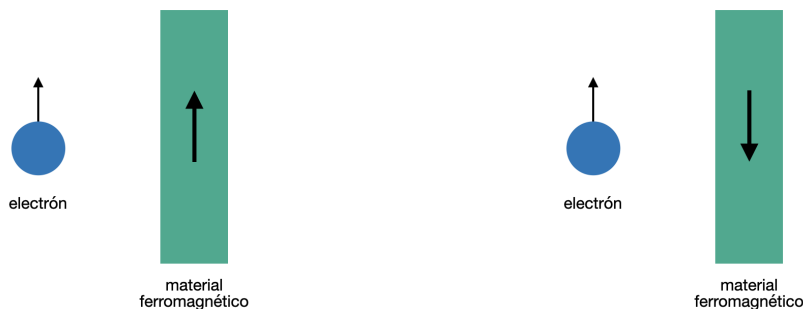
lo que implica un momento angular de $\ell = 2$ y un espín total de $s = 2$, por lo tanto un momento magnético más fuerte, que se acopla con los momentos magnéticos de los electrones vecinos. Este acoplamiento hace que, en este tipo de materiales, los momentos magnéticos mantengan una orientación idéntica una vez el campo magnético externo ha sido apagado. Esto es lo que ocurre con un imán que ha sido magnetizado por el campo magnético de la Tierra y mantiene su magnetización.

6.4 Espintrónica

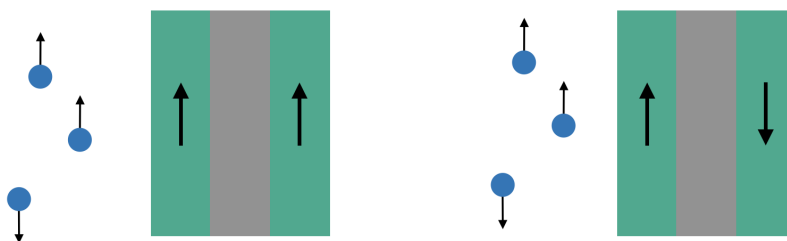
En cualquier material, tenemos una resistencia que surge debido a las interacciones de los electrones con la red atómica del material, impurezas y otros defectos. Diferentes materiales tienen resistividades intrínsecas variadas, con conductores como el cobre teniendo baja resistencia y aislantes como el caucho teniendo alta resistencia. La temperatura generalmente aumenta la resistividad en conductores, ya que las vibraciones térmicas aumentadas de los átomos dispersan más a los electrones. Por supuesto, la resistividad es un problema en dispositivos electrónicos porque perdemos energía. Así que uno de los objetivos interesantes sería reducir la resistencia de un material. Esto es lo que hace la magnetoresistencia gigante (MRG), o giant magnetoresistance (GMR), que fue descubierta de forma independiente en 1998 por los grupos de Albert Fert y Peter Grünberg, quienes recibieron el Premio Nobel de Física en 2007.

Normalmente, observamos la resistividad del movimiento de los electrones basándonos únicamente en su carga debido a la interacción coulombiana, pero también debemos considerar el espín de los electrones para una mejor comprensión.

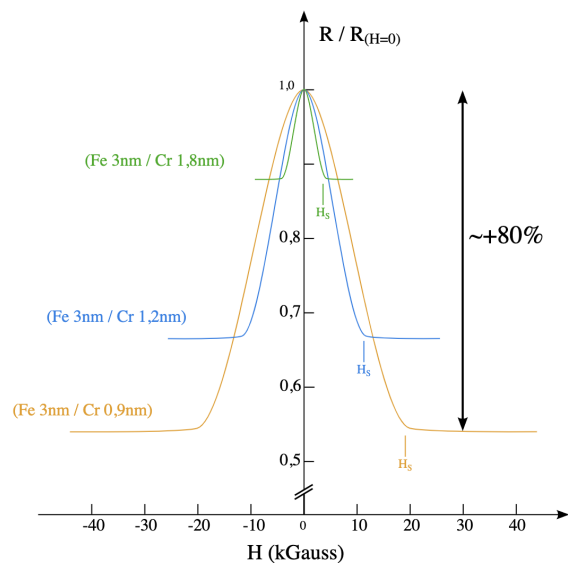
En materiales ferromagnéticos, los electrones con espín alineados con la magnetización del material y aquellos con espín opuestos experimentan diferentes tasas de dispersión.



En el caso de la situación de la parte izquierda, el electrón pasa ya que su espín tiene la misma orientación que la magnetización del material aunque en el segundo caso, el electrón no pasa.

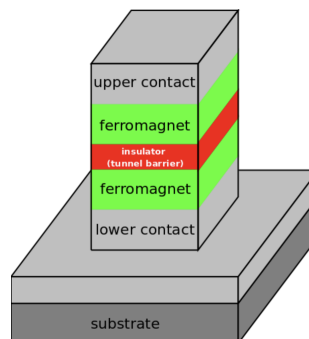


La estructura GMR más común consiste en capas alternas de materiales ferromagnéticos (como hierro o cobalto) y espaciadores no magnéticos (como cobre). Estas capas suelen tener solo unos pocos nanómetros de grosor, lo que significa que la naturaleza cuántica de los electrones se vuelve significativa. Incluso si los electrones libres pudieran tener cualquier espín, cuando se acercan a un material magnetizado, obtienen una orientación de espín preferida; hablamos de electrones de espín mayoritario y electrones de espín minoritario. Cuando las magnetizaciones de las capas ferromagnéticas están alineadas en la misma dirección, los electrones de espín mayoritario (que se alinean con la magnetización) pasan fácilmente porque hay menos eventos de dispersión. Sin embargo, los electrones de espín minoritario experimentan más dispersión. Esto conduce a una menor resistencia eléctrica en general. Cuando las magnetizaciones de las capas ferromagnéticas están alineadas de manera opuesta (antiparalela), tanto los electrones de espín arriba como los de espín abajo experimentan una mayor dispersión, ya que ninguna orientación de espín puede moverse libremente a través de ambas capas. Esto aumenta la resistencia eléctrica total. El principio clave de la GMR es que la resistencia eléctrica depende de si los momentos magnéticos de las capas ferromagnéticas adyacentes están alineados en paralelo o antiparalelo. La capacidad de cambiar la resistencia aplicando un campo magnético externo, que afecta la alineación, es la base de las aplicaciones tecnológicas de la GMR.



Veamos en este caso, una disminución de 80% de la resistencia en aumentar el campo magnético es decir en producir una magnetización de los materiales ferromagnéticos.

Estos tipos de efectos pueden tener aplicaciones como por ejemplo la MRAM (RAM magnetorresistiva) que es un tipo de memoria. Esta compuesta de celdas, llamadas unión de túnel magnetorresistiva, que consta de dos capas ferromagnéticas separadas por una fina barrera aislante. Una capa (la capa de referencia) tiene una dirección de magnetización fija, mientras que la otra capa (la capa libre) puede cambiar su dirección de magnetización. La alineación relativa de las magnetizaciones determina la resistencia de la unión. Para una alineación paralela es decir una resistencia baja, representa un 0 mientras que para una alineación antiparalela o resistencia alta representa un 1. Así que aplicando un campo magnético o una corriente podemos cambiar la orientación de la magnetización de una de las capas. Esta configuración permanecerá así aunque se corte la corriente debido al material ferromagnético. Para leer esta celda, podemos pasar una corriente y medir la resistividad. Si la resistividad es baja, es 0 y si es alta, es 1. Así que la MRAM consiste en tener miles de millones de estas células fundamentales que podemos manipular fácilmente. Aunque tenemos un aislante, el efecto túnel produce que los electrones pasan. El efecto esta aún mejor cuando las capas tienen la misma orientación.



7. Física nuclear

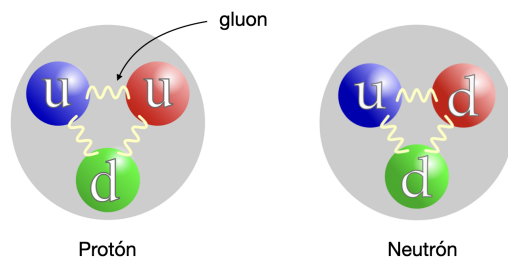
Un átomo se compone de un núcleo rodeado por electrones. Hemos analizado el caso más sencillo: el problema de dos cuerpos, que corresponde al átomo de hidrógeno. Sin embargo, en un sistema con Z protones y N neutrones ($A = N + Z$ nucleones), el problema se complica significativamente. Este se convierte en un problema de A cuerpos que no puede resolverse analíticamente, y la situación se agrava al considerar otras interacciones fundamentales (fuerte y débil) necesarias para comprender la diversidad de los átomos.

Si únicamente existiera la fuerza electromagnética, los átomos no podrían formarse, ya que los protones, al tener carga positiva, se repelen entre sí. Por lo tanto, la existencia de los átomos es posible gracias a una otra fuerza, la fuerza fuerte, que estabiliza el núcleo. La fuerza fuerte carece de un equivalente clásico y debe estudiarse mediante la mecánica cuántica. Su descripción, altamente no lineal, hace imposible un tratamiento analítico directo. Se aborda a través de una teoría conocida como cromodinámica cuántica (QCD, por sus siglas en inglés), cuya principal dificultad radica en la interacción de los gluones.

Los protones y neutrones no son partículas elementales, sino que están compuestos por quarks y gluones. En la naturaleza, existen seis tipos de quarks y ocho gluones, que son fundamentales para la estructura y dinámica del núcleo atómico.

- Up (u), Down (d)
- Charm (c), Strange (s)
- Top (t), Bottom (b)

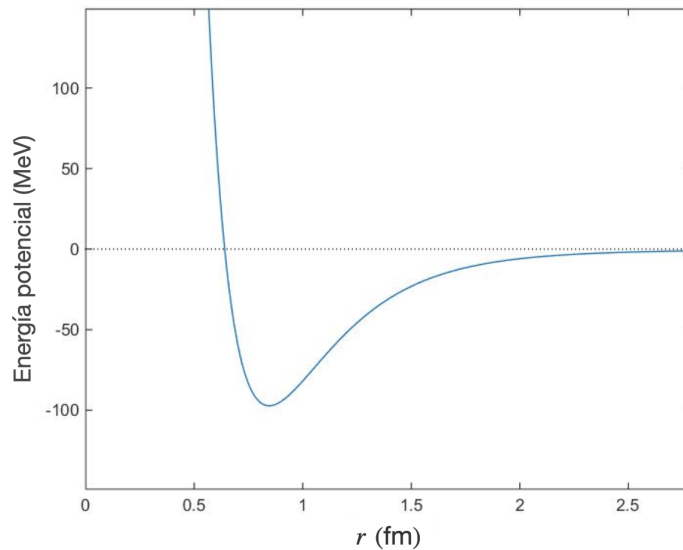
Un protón está compuesto de 2 quarks up y 1 quark down (uud), además de un número indefinido de gluones.



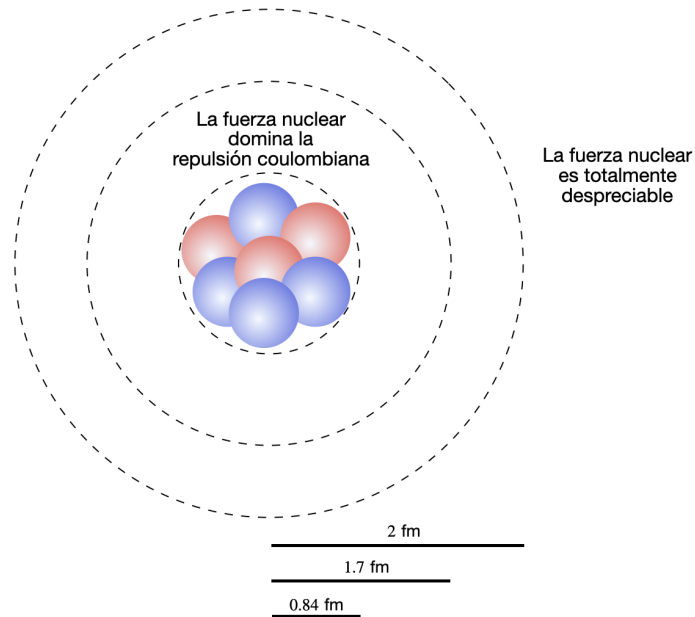
Los gluones son los vectores (es decir, los mediadores) de la interacción fuerte y "pegan" (de ahí su nombre, que significa "pegar") los quarks entre sí si intentan escapar.

A esto se le llama confinamiento. Los gluones son bosones (como todos los vectores de interacción) y los quarks son fermiones. Sabemos por el principio de Heisenberg que pueden aparecer a partir del vacío, partículas de una energía ΔE durante un tiempo Δt tal que $\Delta E \cdot \Delta t \simeq \hbar/2$.

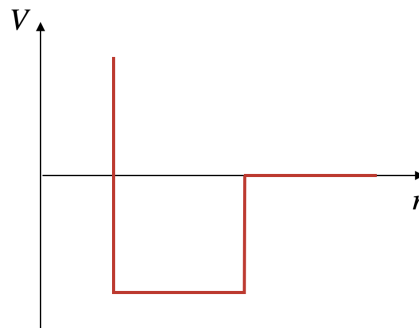
Por ejemplo, en el electromagnetismo, pueden aparecer pares de positrones y electrones e^+e^- . Tomar en cuenta estos efectos se llama correcciones radiativas. Lo mismo ocurre en QCD pero en vez de un fotón, tenemos 8 gluones que pueden interactuar entre si ya que es una teoría no-lineal. Esta producción de gluones complica mucho el estudio de esta fuerza. Pero, por suerte, para entender el núcleo no necesitamos conocer lo que ocurre a estas escalas. Para un objeto interactuando con un núcleo, solo aparece una fuerza residual de la fuerza fuerte, llamada fuerza nuclear cuyo potencial fenomenológico y numérico es



Veamos que la fuerza nuclear es atractiva, a grandes distancias aunque a muy pequeñas distancias, aparece una forma de barrera infinita y por lo tanto, repulsiva. Finalmente a distancias $\gtrsim 2$ fm, la fuerza nuclear es casi nula.



Este potencial nuclear puede ser aproximado al potencial de abajo. Este potencial puede ser usado en la ecuación de Schrödinger para obtener los niveles energéticos accesible al núcleo.



De forma similar a los electrones, la resolución de la ecuación de Schrödinger muestra que las energías de los nucleones en el núcleo están cuantizadas. Existen capas nucleares análogas a las capas electrónicas. El llenado completo de una capa corresponde a ciertos números específicos de nucleones, llamados números mágicos. Estos son 2, 8, 20, 28, 50, 82 y 126, y están asociados con núcleos especialmente estables.

La inestabilidad de los núcleos da lugar a un fenómeno conocido como radiactividad. Para introducir este concepto, es necesario definir la energía de enlace nuclear, E_B (con B por *bonding*). Para un núcleo de masa M , compuesto por N neutrones y Z protones

($A = N + Z$), se cumple la relación:

$$Mc^2 = Nm_Nc^2 + Zm_p c^2 - E_B \quad (7.1)$$

con Mc^2 la energía total, Nm_Nc^2 la energía de los protones si eran libre y $Zm_p c^2$ la energía de los neutrones si eran libre

$$m_Nc^2 = 940 \text{ MeV}, \quad m_p c^2 = 938 \text{ MeV}$$

con $1 \text{ MeV} \approx 1,6 \cdot 10^{-13} \text{ J}$. Pero, como $m_e c^2 = 511 \text{ keV}$ podemos deducir que 99,9% de la masa de un átomo se encuentra en el núcleo.

A partir de la ecuación (7.1), observamos que, para un estado ligado, la energía de enlace E_B es positiva, lo que implica que $Nm_N + Zm_p > M$. Esto significa que, para separar el sistema ligado con masa M en partículas libres, es necesario suministrar al sistema una energía igual a E_B .

Además, podemos definir la energía de separación, E_S , que corresponde a la energía necesaria para extraer un nucleón del núcleo, pasando de un sistema con A nucleones a otro con $A - 1$ nucleones. Si, se elimina un protón

$$\begin{aligned} E_S &= E_B(A) - E_B(A - 1) \\ &= (Nm_Nc^2 + Zm_p c^2 - M(A)c^2) - (Nm_Nc^2 + (Z - 1)m_p c^2 - M(A - 1)c^2) \\ &= m_p c^2 + M(A - 1)c^2 - M(A)c^2 \end{aligned} \quad (7.2)$$

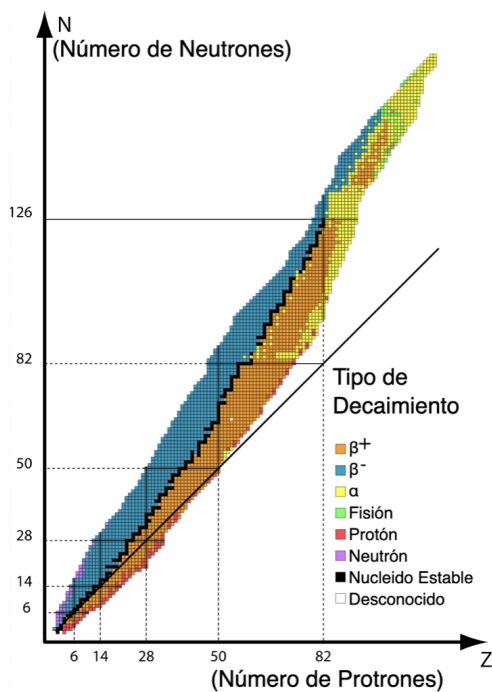
De forma similar, se puede encontrar la energía para eliminar un neutrón. De forma genérica, tenemos

$$E_S = m_X c^2 + M(A - 1)c^2 - M(A)c^2 \quad (7.3)$$

con m_X la masa del nucleón emitido, $M(A - 1)$ la masa del núcleo final y $M(A)$ la masa del núcleo inicial.

Los núcleos con un número par de protones o neutrones presentan una energía de separación mayor (alrededor de 1 MeV) debido a que tienden a formar pares, lo que aumenta su estabilidad.

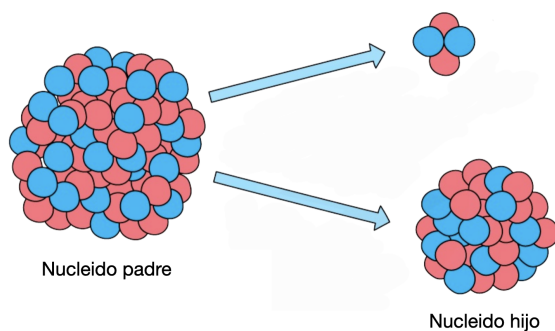
De los aproximadamente 7000 núcleos predichos por los modelos teóricos, solo cerca de 300 son estables o tienen tiempos de desintegración extremadamente largos. Esto implica que aproximadamente el 95% de los núcleos son radiactivos, es decir, inestables.



En este gráfico, solo los núcleos representados en negro son estables. Se llama a la valle de estabilidad. Los demás, de manera espontánea, decaen con la emisión de una partícula. Para valores grandes de A , se requiere un mayor número de neutrones que de protones para mantener la estabilidad del núcleo.

Sin embargo, nunca se puede estar completamente seguro de la estabilidad de un núcleo. Un ejemplo es el descubrimiento en 2003 de la inestabilidad del ^{208}Pb , con un tiempo de vida de aproximadamente $3 \cdot 10^{19}$ años, que supera la edad del Universo.

Los diferentes tipos de radiactividad se distinguen según las fuerzas responsables de la inestabilidad: fuerte, débil o electromagnética. Durante este proceso, un nucleido padre se transforma en un nucleido hijo acompañado de la emisión de una partícula.



Nota que La fisión puede ser considerada como un tipo de radioactividad ya que tenemos un nucleido padre que se rompe en varios (usualmente dos) nucleidos hijos.

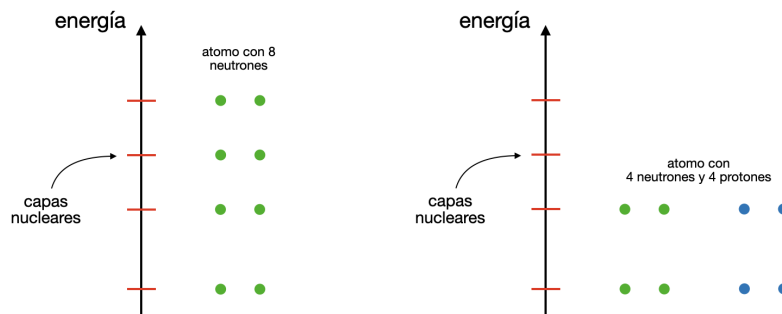
Como lo hemos dicho, el problema de A cuerpos es difícil, por lo tanto se usa un modelo. El más cercano a las observaciones es el modelo de la gota líquida. Se postula que la energía de ligadura del núcleo es (Weizsäcker-Bethe-Bacher-Wigner-Bohr-Wheeler)

$$E_B(N, Z) = a_V A - a_S A^{2/3} - a_C \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - a_A \frac{(N-Z)^2}{A} + \delta \quad (7.4)$$

- $a_V A$ es un término de volumen, por lo tanto es proporcional al número de nucleones A . Viene de la interacción fuerte y por lo tanto es positivo, ya que es una fuerza atractiva.
- El término $-a_S A^{2/3}$ es un término correctivo, ya que los nucleones en la superficie del núcleo tienen menos interacciones que los nucleones internos. Si el volumen del núcleo es proporcional a A , entonces la superficie será proporcional a $(A^{1/3})^2$.

El sistema busca minimizar esta energía superficial, como una gota líquida.

- $-a_C \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}$ es el término coulombiano, por lo tanto repulsivo entre los Z protones. Cada protón tiene interacción con los $Z-1$ otros protones, lo que produce $Z(Z-1)/2$ interacciones entre estos átomos es decir algo del orden $Z(Z-1)/r$ con $r \simeq A^{1/3}$ la distancia media entre los protones.
- El término $-a_A \frac{(N-Z)^2}{A}$ nos indica que, para cualquier valor de $N \neq Z$, la configuración es desfavorable. Este término proviene del principio de exclusión de Pauli. Dado que los nucleones son fermiones, no pueden ocupar todos el mismo estado cuántico, por lo que deben llenarse capas nucleares sucesivas, lo que genera una configuración menos estable. Sin embargo, si algunos neutrones (o protones) se convierten en protones (o neutrones), el sistema tiende a estabilizarse.



- δ , el átomo es más estable cuando hay un número par de protones y neutrones, eso viene del espín. Dos nucleones con espín $\uparrow\downarrow$ se juntan. Si N y Z son par δ debe ser positivo. Si N y Z son impar $\delta < 0$ y finalmente si N o Z es par $\delta = 0$. Cuando $\delta \neq 0$ se elige $\delta \approx 1$ MeV.

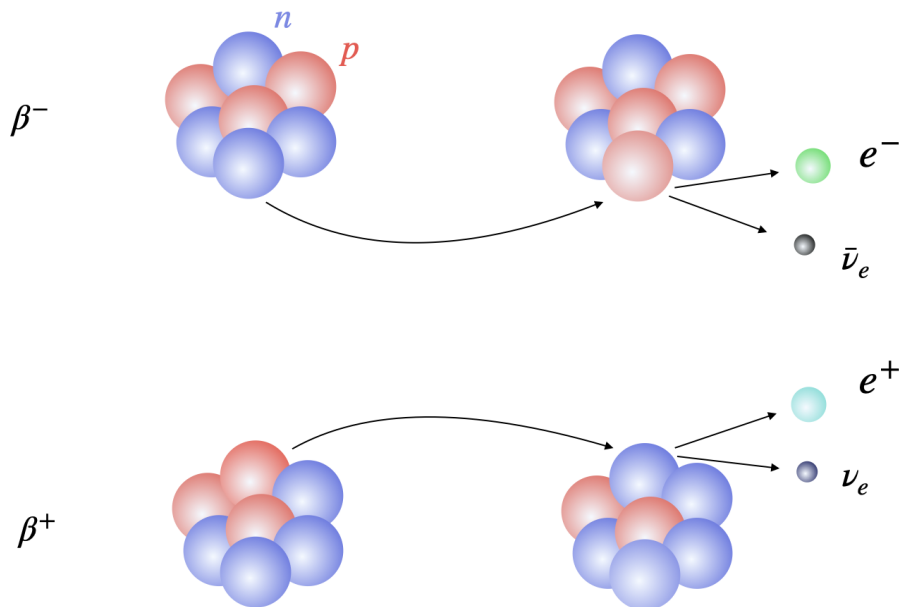
Los coeficientes $a_V, a_S, a_C, a_A, \delta$ son deducido por experimentos.

7.1 Radioactividad β

Los neutrones (protones) pueden transformarse en protones (neutrones)

$$\begin{cases} n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e \\ p \rightarrow n + e^+ + \nu_e \end{cases}$$

con e^+ un positrón, ν_e un neutrino electrónico y $\bar{\nu}_e$ un antineutrino electrónico. Estas transformaciones se realizan por una fuerza llamada débil.



Para estas desintegraciones, A es fijo. Se dice que es una radiactividad isobaro. Es porque la interacción débil no es lo suficientemente fuerte para arrancar nucleones, ligados por la fuerza fuerte. Los núcleos estable bajo la desintegración beta deben maximizar la energía de ligadura, es decir buscamos

$$\left. \frac{\partial E_B(A, Z)}{\partial Z} \right|_{A \text{ fijo}} = 0$$

Es decir

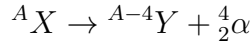
$$Z = \frac{4A + \alpha A^{2/3}}{8 + 2\alpha A^{2/3}}, \text{ con } \alpha = \frac{a_C}{a_A} \simeq 0.03$$

Vemos que para pequeños núcleos $Z \simeq A/2$ es decir $N = Z$. Aunque para núcleos masivos, $N > Z$, es decir que necesitamos más neutrones que protones por la interacción coulombiana ($\alpha = a_C/a_A$)

7.2 Radioactividad α

Para átomos muy masivos ($A \gg 1$), y por lo tanto más grande, la fuerza fuerte no permite mantener el núcleo (la fuerza tiene un rango muy pequeño). La fuerza coulombiana gana y el núcleo emite una partícula α (es decir 2 protones más 2 neutrones) para estabilizarse. Se emite una partícula α y no otra combinación como por ejemplo un protón más un neutrón ya que la partícula α tiene una energía de ligadura muy importante. Es más fácil emitir una partícula α entera que sus componentes.

Para que una desintegración α ocurra, necesitamos un valor de energía liberada (Q) positiva



$$Q = E_B(\alpha) + E_B(Y) - E_B(X) \quad (7.5)$$

$$= E_B(\alpha) - (E_B(X) - E_B(Y)) \quad (7.6)$$

$$= E_B(\alpha) - \delta E_B \quad (7.7)$$

$$\simeq E_B(\alpha) - \frac{\partial E_B}{\partial Z} \delta Z - \frac{\partial E_B}{\partial A} \delta A \quad (7.8)$$

con δE_B la variación de la energía de ligadura entre los nucleido padre y hijo. En este caso, tenemos $\delta Z = 2$ y $\delta A = 4$ y por lo tanto

$$Q = E_B(\alpha) - 4a_V + \frac{8a_S}{3A^{1/3}} - 4a_A \left(1 - 2\frac{Z}{A}\right)^2 + \frac{2a_C}{3A^{4/3}} (2Z(1 + 3A - Z) - 3A)$$

El último termino es positivo, es decir que el termino coulombiano favorece la desintegración. También sabemos que $E_B(\alpha) = 28.3$ MeV. Se encuentra numéricamente que $Q > 0$ para $A > 150$, confirmando que la radioactividad α afecta los núcleos mas masivos.

7.3 Fusión y Fisión

En el caso de la fusión y la fisión, la energía esta emitida, por lo tanto queremos $Q > 0$ en una reacción de tipo $1 + 2 \rightarrow 3 + 4$, es decir

$$Q = E_B(3) + E_B(4) - E_B(1) - E_B(2) > 0 \quad (7.9)$$

pero podemos escribir que

$$\frac{Q}{A} = \frac{1}{A} \left[A_3 \frac{E_B(3)}{A_3} + A_4 \frac{E_B(4)}{A_4} \right] - \frac{1}{A} \left[A_1 \frac{E_B(1)}{A_1} + A_2 \frac{E_B(2)}{A_2} \right] \quad (7.10)$$

con $A = A_1 + A_2 = A_3 + A_4$ (por la conservación del numero de núcleos). Tenemos por lo tanto

$$\frac{Q}{A} = \left\langle \frac{E_B}{A} \right\rangle_{\text{final}} - \left\langle \frac{E_B}{A} \right\rangle_{\text{inicial}}$$

con $\langle X \rangle$ el promedio

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_i A_i X_i}{\sum_i A_i} \equiv \frac{\sum_i A_i X_i}{A} \quad (7.11)$$

Lo que implica que $Q > 0$ si

$$\left\langle \frac{E_B}{A} \right\rangle_{\text{final}} > \left\langle \frac{E_B}{A} \right\rangle_{\text{inicial}} \quad (7.12)$$

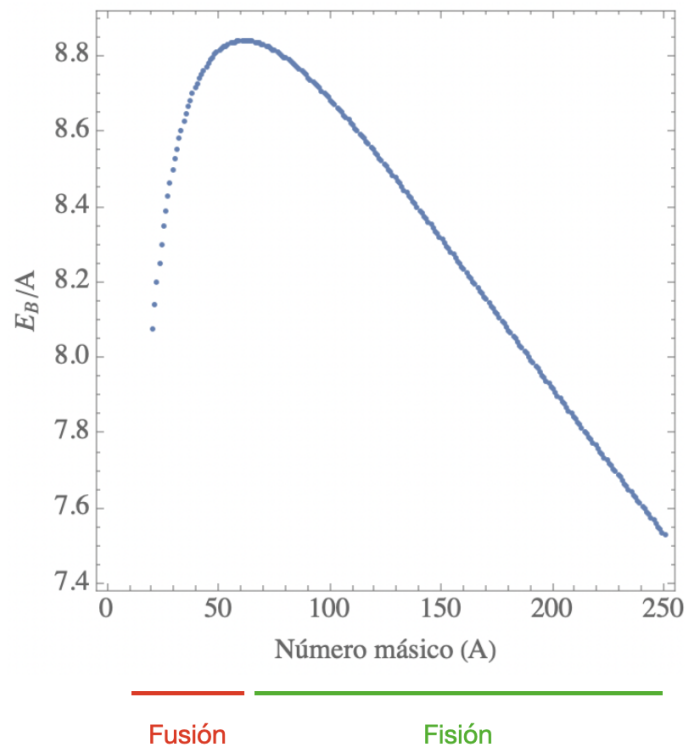
Podemos representar E_B/A en función de A , usando la ec.(7.4). Para Z , se toma como primera aproximación, la formula para los átomos estable según la desintegración β , es decir

$$Z = \frac{4A + \frac{a_C}{a_A} A^{2/3}}{8 + 2\frac{a_C}{a_A} A^{2/3}}$$

Obviamente $N = A - Z$ y usamos los valores de las constantes

$$a_V = 15.75\text{MeV}, \quad a_S = 17.8\text{MeV}, \quad a_C = 0.711\text{MeV}, \quad a_A = 23.7\text{MeV}$$

Podemos considerar $\delta = 0$ (aunque no cambia mucho). De esta ecuación, se deduce la curva de Aston, que tiene un máximo para $A = 56$ (hierro). El sistema busca aumentar B/A , es decir que $\left\langle \frac{B}{A} \right\rangle_{\text{final}} > \left\langle \frac{B}{A} \right\rangle_{\text{inicial}}$, por lo tanto para $A < 56$ podemos tener fusión (es decir un aumento de A), aunque para $A > 56$, podemos tener fisión.



Para la fisión, el núcleo debe deformarse hasta romper. Se necesita típicamente 5 o 6 MeV. Es una barrera de energía que debemos sobrepasar. Por esa razón se definen 3 tipos de fisiones

- Fisión espontanea, ocurre solamente para los núcleos más masivos. El efecto túnel es lo que permite pasar esta barrera.
- Fisión inducida por neutrón lento. Una partícula (usualmente 1 neutrón) es capturado por un núcleo, lo que luego produce una fisión. La partícula tiene baja energía (lenta).
- Fisión inducida por neutrón rápido.

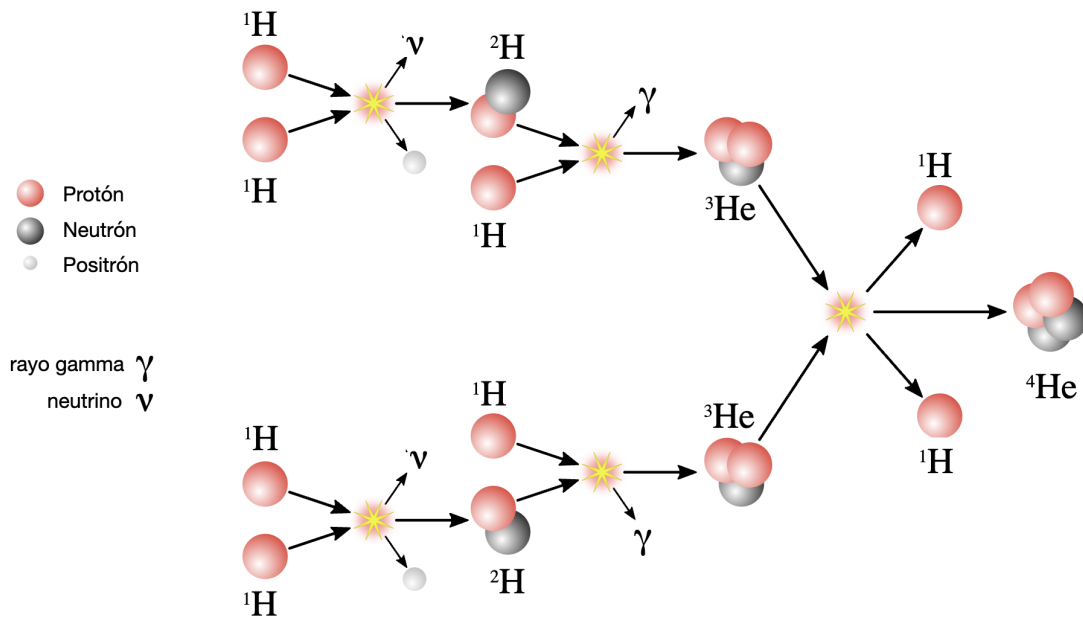
Usualmente se usa el uranio 235, ^{235}U , que puede ser fisible por neutro lento y rápido. La fisión de ^{235}U produce usualmente 2 a 4 neutrones rápido. Según la curva de Aston, la fisión produce un poco menos de 1 MeV por nucleón i.e. aproximadamente 200 MeV para ^{235}U . Para la fisión de 1 kg de ^{235}U , tenemos una energía de

$$E = \frac{E_B}{A} \simeq \frac{E_u N_B M}{A} \tag{7.13}$$

$$= \frac{200 \cdot 10^6 \times 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J} \times 6,02 \cdot 10^{23} \times 1000}{235} \approx 10^{14} \text{ J} \tag{7.14}$$

con N_B el numero de Avogadro. Para un reactor de potencia 16 W durante un día, necesitamos una masa m de ^{235}U de $m = \frac{10^9}{10^{14}} \times 24 \times 3600 \simeq 1$ kg. Como el rendimiento de un reactor es del orden de 30%, se necesita 3 kg de ^{235}U por día.

Por otro lado, la fusión emite energía para elementos livianos ($A < 56$). Es una ventaja ya que es más fácil encontrar estos elementos en la Tierra. Además de que produce más energía ya que tenemos una pendiente más fuerte en la curva de Aston. Existen varios tipos de fusiones, según la reacción. Por ejemplo, existe la fusión estelar. Es una cadena de fusiones comenzando con



Para producir este tipo de fusión en la Tierra, necesitamos que los protones se acercan, es decir superar la barrera coulombiana, es decir dar mucha energía cinética. Varios mecanismos se están estudiando actualmente. Lo que obviamente se busca, es obtener más energía que lo que usamos para iniciar la fusión. El 13-12-2022, el departamento de energía de los estados unidos comunico haber usado $2.05 \cdot 10^6$ J para producir $3.15 \cdot 10^6$ J (un factor de $Q = 1.54$). Se usa un confinamiento (compresión) usando láser de alta potencia, lo que aumenta la densidad y temperatura. Eso inicia la fusión. En 2025, el sistema ITER (proyecto internacional) usando campo magnético debería iniciar con la proyección de $Q = 50$!!!

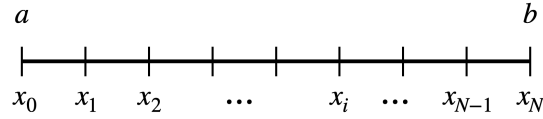
Computación cuántica

8. El espín como sistema cuántico bidimensional

Como lo hemos visto en los capítulos previos, el estado de una partícula está descrito por una función de onda que depende del espacio y del tiempo $\psi(t, \mathbf{r})$ pero también de la información sobre el espín. Conocer solamente la probabilidad de encontrar la partícula en algún lugar es incompleto, hay que saber también su estado de espín que denotaremos χ_S . Por lo tanto, la función de onda total es $\psi(t, \mathbf{r})\chi_S$. Hasta ahora, hemos solamente estudiado la ecuación de Schrödinger que actúa sobre la parte ψ , de hecho tenemos para el caso de un problema en una dimensión e independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (8.1)$$

Pero no tenemos ninguna ecuación para la parte espín χ_S . Para eso, vamos a reescribir la ecuación de Schrödinger de forma distinta. Usando método de diferencia finita, podemos discretizar nuestro espacio para resolver el problema de forma numérica. Es una técnica numérica utilizada para resolver ecuaciones diferenciales mediante la aproximación de derivadas con diferencias. Como ejemplo, se describe este proceso para un problema unidimensional en el intervalo $[a, b]$. Este intervalo $[a, b]$ se divide en $N + 1$ puntos igualmente espaciados, creando una malla. La distancia, o tamaño de paso, entre puntos consecutivos es $\Delta x = \frac{b-a}{N}$. Estos puntos se etiquetan como $x_0, x_1, \dots, x_{N-1}, x_N$, donde $x_0 = a$ y $x_N = b$.



Para una función $\psi(x)$ definida en $[a, b]$, las derivadas en cada punto x_i se aproximan utilizando diferencias finitas. Por ejemplo, tenemos para la primera derivada:

$$\psi'(x_i) \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - \psi(x_i)}{\Delta x} \quad (8.2)$$

lo que corresponde a la pendiente de la recta entre los 2 puntos, x_i y x_{i+1} . Para la segunda derivada tenemos

$$\psi''(x_i) \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{(\Delta x)^2} \quad (8.3)$$

Estas aproximaciones transforman las ecuaciones diferenciales en ecuaciones algebraicas en cada punto de la malla. Obviamente más aumentamos N , más nos acercamos del resultado esperado. Usando este formalismo, podemos escribir la ecuación de Schrödinger (8.1) en cada punto x_i , de la forma siguiente

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{(\Delta x)^2} + V(x_i) \psi_i = E\psi(x_i) \quad (8.4)$$

Por lo tanto, si escribimos todos los valores de la función como un vector

$$\begin{pmatrix} \psi(x_0) \\ \psi(x_1) \\ \vdots \\ \psi(x_N) \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

Definiendo $\alpha = -\hbar^2/2m(\Delta x)^2$ y $V_i = V(x_i)$, la ecuación de Schrödinger se transforma en una ecuación matricial

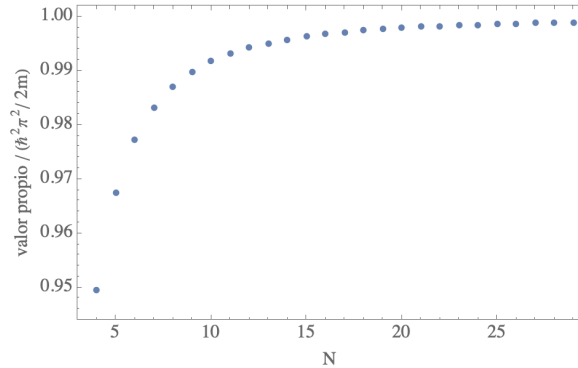
$$\begin{pmatrix} \text{condición de borde en } x_0 \\ \alpha & -2\alpha + V_1 & \alpha & 0 & \cdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & 0 & \alpha & -2\alpha + V_{N-1} & \alpha \\ \text{condición de borde en } x_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(x_0) \\ \psi(x_1) \\ \vdots \\ \psi(x_{N-1}) \\ \psi(x_N) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi(x_0) \\ \psi(x_1) \\ \vdots \\ \psi(x_{N-1}) \\ \psi(x_N) \end{pmatrix} \quad (8.6)$$

Donde hemos usado la primera y la última líneas para definir nuestras condiciones de borde. Con esta notación, observamos que la función de onda evaluada en los puntos,

x_i , forma un vector tal que es el vector propio de la matriz aunque la energía, E , aparece como los valores propios de la misma matriz. Esta matriz se llama el hamiltoniano, H , del sistema. Para ver el problema de forma más concreta, podemos resolver el problema de una partícula en una caja que hemos resuelto en la sección (5.1). En este caso el potencial es nulo además de considerar las condiciones de borde $\psi(x_0) = \psi(x_N) = 0$. Por lo tanto la matriz puede ser escrita

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{con } \Delta x = \frac{1-0}{N} = \frac{1}{N} \quad (8.7)$$

Podemos calcular, numéricamente los valores propios de esta matriz por un N dado, es decir para una discretización dada. Más aumenta el valor de N y más deberíamos recubrir los resultados pasados. El número de valores propios aumenta con N y es infinito en el límite de N infinito, lo que corresponde al resultado ya encontrado; existen un numero infinitos de valores de la energía. A continuación se ha calculado los valores propios para diferentes tamaños de la matriz y enfocándose en el valor propio más pequeño⁹ obtenemos



Claramente observamos una convergencia hacia el valor propio $\hbar^2\pi^2/2m$ lo que corresponde al resultado (5.19). Por lo tanto, en el límite $N \rightarrow \infty$, obtenemos exactamente los mismos resultados que en el caso de la ecuación de Schrödinger. Son formalismos equivalente. En este límite, la matriz es de tamaño infinito y será denotada H y el

⁹Aparecen para cada N varios valores propios que desaparecen cuando cambiamos N , estos valores no deben ser considerados.

vector es también de dimensión infinita y puede ser escrito con la notación de Dirac $|\psi\rangle$. Por lo tanto podemos escribir la ecuación de Schrödinger de la forma siguiente

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (8.8)$$

De forma similar, podemos asociar un vector al estado que describe el espín. Como el espín puede tomar 2 valores, este vector será 2 dimensional a diferencia del vector de estado que describe la función de onda que es de dimensión infinita. Es un vector de dimensión 2 y puede ser complejo. En ese caso se llama un espinor en vez de un vector. De forma similar, la matriz, o el operador, que actúa sobre este espinor es una matriz, posiblemente compleja, de dimensión 2×2 .

9. Notación bra-ket

La notación bra-ket, introducida por Paul Dirac, se utiliza ampliamente en mecánica cuántica porque proporciona un marco claro y cómodo para representar estados y operaciones en un espacio vectorial. Como lo hemos visto podemos definir un estado de 2 dimensiones como un "ket"

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9.1)$$

El "bra" de este vector es la transposición conjugada, que para nuestro ejemplo tiene el aspecto siguiente

$$\langle\chi| = \begin{pmatrix} 1^* \\ 0^* \end{pmatrix}^T = (1 \ 0) \quad (9.2)$$

El producto escalar se define como la multiplicación entre un bra y un ket. Si por ejemplo, consideramos el producto escalar del vector definido en (9.1) con

$$|\xi\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad (9.3)$$

obtenemos

$$\langle\chi|\xi\rangle = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} = 1 \cdot 2 + 0 \cdot 3 = 2 \quad (9.4)$$

En este contexto, un vector que tiene el producto escalar con si mismo igual a 1 es un vector normalizado. Por ejemplo si

$$|\chi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+i \\ 1-i \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

obtenemos

$$\langle \chi | = \frac{1}{2} (1 - i \ 1 + i) \quad (9.6)$$

lo que implica

$$\langle \chi | \chi \rangle = \frac{1}{4} (1 - i \ 1 + i) \begin{pmatrix} 1 + i \\ 1 - i \end{pmatrix} = \frac{1}{4} (2 + 2) = 1 \quad (9.7)$$

10. El qubit

Desde Shannon y los inicios de la teoría de la información, el bit ha sido el término básico de la información clásica. Los estados de un bit son 0 o 1. De acuerdo con el concepto clásico, en la información cuántica existe el qubit¹⁰ (abreviatura de bit cuántico). Como para el bit clásico, son posibles dos estados, $|0\rangle$ y $|1\rangle$. Como hemos visto anteriormente, podemos representar los dos estados ortogonales, $|0\rangle$ y $|1\rangle$ ¹¹, como vectores columna

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.1)$$

La principal diferencia con el bit clásico, que sólo acepta 0 ó 1, es que un qubit también permite estados intermedios entre $|0\rangle$ y $|1\rangle$, que se denominan superposiciones

$$|\chi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (10.2)$$

con α, β 2 números complejos. Obviamente si pedimos que el estado sea normalizado, debemos fijar la condición $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ ya que

$$\langle \chi | \chi \rangle = (\alpha^* \ \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \quad (10.3)$$

o de forma equivalente

$$\begin{aligned} \langle \chi | \chi \rangle &= (\alpha^* \langle 0| + \beta^* \langle 1|) \cdot (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha^* \alpha \langle 0|0\rangle + \beta^* \alpha \langle 1|0\rangle + \alpha^* \beta \langle 0|1\rangle + \beta^* \beta \langle 1|1\rangle \\ &= |\alpha|^2 + 0 + 0 + |\beta|^2 = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \end{aligned} \quad (10.4)$$

Los qubit son por lo tanto una superposición de 2 vectores, es decir que los vectores $|0\rangle$ y $|1\rangle$ definen una base sobre la cual se define el qubit. Estos vectores forman la

¹⁰En algunos textos en español se usa la palabra cúbit pero en esta clase voy a guardar la forma del inglés qubit

¹¹Son ortogonales ya que $\langle 0|1\rangle = 0$

base estándar. Pero obviamente podemos definir otra base, como por ejemplo la base de Hadamard

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.5)$$

Es fácil verificar que estos 2 vectores son normalizados y ortogonales ($\langle + | - \rangle = 0$). De esta forma, tendremos un qubit definido en la base de Hadamard de la forma siguiente

$$|\chi\rangle = \gamma|+\rangle + \delta|-\rangle, \quad \text{con } |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1 \quad (10.6)$$

10.1 Múltiples qubits

Clásicamente, si tenemos dos bits, los escribimos como "00", "01" y así sucesivamente. Pero, ¿cómo podemos escribir dos qubits? Una estrategia es asociar cada uno de los dos bits clásicos $x_1, x_2 \in \{0, 1\}^2$ con un vector. Etiquetando el primer qubit como A y el segundo como B , podríamos realizar la asignación de cadenas a vectores ortonormales de la siguiente manera:

$$0_A 0_B \rightarrow |00\rangle_{AB} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.7)$$

De forma genérica, se puede construir múltiples qubits con la noción de producto tensorial. Supongamos que tenemos 2 qubits

$$|\psi\rangle_A = \alpha_A|0\rangle_A + \beta_A|1\rangle_A = \begin{pmatrix} \alpha_A \\ \beta_A \end{pmatrix} \quad (10.8)$$

$$|\phi\rangle_B = \alpha_B|0\rangle_B + \beta_B|1\rangle_B = \begin{pmatrix} \alpha_B \\ \beta_B \end{pmatrix} \quad (10.9)$$

El producto tensorial es

$$|\xi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B = \begin{pmatrix} \alpha_A \\ \beta_A \end{pmatrix} \otimes |\psi\rangle_B = \begin{pmatrix} \alpha_A|\psi\rangle_B \\ \beta_A|\psi\rangle_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_A\alpha_B \\ \alpha_A\beta_B \\ \beta_A\alpha_B \\ \beta_A\beta_B \end{pmatrix} \quad (10.10)$$

lo que nos permite recubrir el resultado (10.7)

$$|00\rangle_{AB} = |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B = \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 \\ 1 \cdot 0 \\ 0 \cdot 1 \\ 0 \cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.11)$$

Podemos por lo tanto obtener la base estándar de dos qubits a partir de la base estándar de los qubits individuales usando la regla del producto tensorial. Recordemos que la base estándar para dos qubits. Por ejemplo,

$$|10\rangle_{AB} = |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes |0\rangle_B = \begin{pmatrix} 0|0\rangle_B \\ 1|0\rangle_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \cdot 1 \\ 0 \cdot 0 \\ 1 \cdot 1 \\ 1 \cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.12)$$

lo que nos permite obtener finalmente la base para 2 qubits

$$|00\rangle_{AB} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |01\rangle_{AB} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle_{AB} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |11\rangle_{AB} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.13)$$

De forma genérica, para N qubits tendremos 2^N vectores que forman una base.

10.2 Medición de un qubit

Qué ocurre si medimos un qubit. Para responder a esta pregunta empecemos con un solo qubit. Como lo hemos visto, las mediciones cuánticas resultan en resultados probabilísticos. Por ejemplo, si el estado $|\chi\rangle$ es una superposición entre $|0\rangle$ y $|1\rangle$, entonces, al medir $|\chi\rangle$, obtenemos diferentes resultados de medición que corresponden a una cierta distribución de probabilidad. La probabilidad de distintos resultados, por ejemplo, para el resultado '0', puede calcularse, en términos generales, "observando cuánto de '0' hay en nuestro vector de qubit". Esto se cuantifica mediante el producto interno entre $|\chi\rangle$ y $|0\rangle$. Más concretamente, consideremos un estado de un solo qubit

$$|\chi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (10.14)$$

donde α y β son números complejos. Al medir el qubit, se obtiene el resultado '0' con probabilidad p_0 y '1' con probabilidad p_1 . Estas probabilidades pueden determinarse calculando los productos internos, es decir haciendo la proyección de nuestro estado sobre el estado por lo cual queremos conocer la probabilidad. Por ejemplo, si queremos conocer la probabilidad de medir '0', debemos calcular

$$p_0 = |\langle 0|\chi\rangle|^2 = \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right|^2 = |\alpha|^2 \quad (10.15)$$

De forma similar, tenemos

$$p_1 = |\langle 1|\chi\rangle|^2 = \left| \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right|^2 = |\beta|^2 \quad (10.16)$$

Veamos ahora porque debemos definir la condición de normalización $\alpha^2 + \beta^2 = 1$, ya que corresponde a la suma de probabilidades

$$p_0 + p_1 = 1 \quad (10.17)$$

La medición puede darnos 0 o 1, y por lo tanto la suma de estas probabilidades deben ser igual a 1.

Podemos construir un estado bien interesante, llamado EPR por Einstein, Podolsky y Rosen. Consideremos dos qubits A y B en el estado de dos qubits. Podemos etiquetar el estado conjunto como AB.

$$|EPR\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle_{AB} + |11\rangle_{AB}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.18)$$

y medimos ambos qubits en la base estándar. Las probabilidades de obtener los resultados 00, 01, 10 y 11 están dadas por

$$p_{00} = p_{11} = \frac{1}{2}, \quad p_{01} = p_{10} = 0 \quad (10.19)$$

es decir que si medimos el valor 0 para el qubit A, el qubit B tiene necesariamente el valor 0, y de forma similar para el valor 1. Se llama un estado entrelazado.

Otra aplicación interesante de los estados cuánticos es producir números verdaderamente aleatorios. Consideremos el siguiente proceso

- Primero, preparamos un qubit en el estado $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$
- Luego, medimos este estado en la base estándar

La probabilidad de obtener cada resultado puede ser calculada de la forma siguiente

$$p_0 = |\langle 0|+\rangle|^2 = \frac{1}{2} \left| \langle 0|(|0\rangle + |1\rangle) \right|^2 = \frac{1}{2} \left| \underbrace{\langle 0|0\rangle}_1 + \underbrace{\langle 0|1\rangle}_0 \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (10.20)$$

$$p_1 = |\langle 1|+\rangle|^2 = \frac{1}{2} \left| \langle 1|(|0\rangle + |1\rangle) \right|^2 = \frac{1}{2} \left| \underbrace{\langle 1|0\rangle}_0 + \underbrace{\langle 1|1\rangle}_1 \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (10.21)$$

Este simple ejemplo ya nos dice algo sobre el poder de la información cuántica: podríamos construir una máquina que prepare de manera determinista el qubit $|+\rangle$, seguido de una medición en la base estándar. Dado que $p_0 = p_1 = 1/2$, esta máquina nos permite producir un número perfectamente aleatorio, aunque no se haya usado ninguna aleatoriedad dentro de nuestra máquina! En contraste, se puede demostrar que ninguna máquina determinista clásica puede producir números aleatorios desde cero.

10.3 Transformaciones sobre los qubit

De forma similar a los bits sobre los cuales podemos realizar operaciones que llamamos puertas lógicas, podemos definir una operación o un operador que actúa sobre el qubit que llamamos puerta cuántica o puerta lógica cuántica. Dado que podemos escribir los estados cuánticos como vectores, buscamos un operador lineal U que transforma vectores a vectores, y podemos fácilmente imaginar que debe ser una matriz. Para un qubit, debe ser una matriz 2×2 aunque por ejemplo para un doble qubit debe ser una matriz 4×4 . . . De forma esquemática, en salida de la puerta cuántica debemos tener un qubit χ_{out} aunque en la entrada teníamos χ_{in}

$$|\chi_{\text{out}}\rangle = U |\chi_{\text{in}}\rangle \quad (10.22)$$

para alguna matriz U que actúa como el operador que representa la puerta lógica cuántica. Recordemos que para cualquier estado cuántico tenemos $\langle\chi|\chi\rangle = 1$. Y también hemos visto que esto es bastante importante, ya que nos indica que la suma de las probabilidades, si medimos el estado, también debe ser 1. Esto significa que la operación U debe preservar el producto interno, es decir, que no tenemos un cambio de la probabilidad total después de esta operación

$$\langle\chi_{\text{out}}|\chi_{\text{out}}\rangle = \langle\chi_{\text{in}}|U^\dagger U|\chi_{\text{in}}\rangle = 1 \quad (10.23)$$

Pero como $\langle\chi_{\text{in}}|\chi_{\text{in}}\rangle = 1$, concluimos que

$$U^\dagger U = \mathbb{1} \quad (10.24)$$

donde $\mathbb{1}$ es la matriz identidad. Vemos que, para preservar las probabilidades, la operación U debe ser unitaria. Recordemos que † significa la matriz traspuesta conjugada.

El ejemplo más simple es la matriz identidad. Para la operación sobre un qubit, tenemos una matriz 2×2 es decir

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (10.25)$$

Obviamente esta matriz es unitaria y define por lo tanto una puerta lógica cuántica que actúa sobre un qubit para transformarlo en su mismo, es decir que no hace nada. Obviamente no es la puerta cuántica más interesante que existe.

10.3.1 Puerta de Hadamard

La puerta de Hadamard es una rotación de un qubit, que mapea los estados de base de qubit $|0\rangle$ y $|1\rangle$ a los estados de la base de Hadamard $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Esto corresponde a la

matriz de transformación

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.26)$$

Es obviamente una matriz unitaria ya que

$$H^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.27)$$

y

$$H^\dagger H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (10.28)$$

Veamos que $H^2 = \mathbb{1}$ es decir que si la puerta de Hadamard se aplica dos veces en sucesión, entonces el estado final siempre es el mismo que el estado inicial. La acción de esta puerta sobre los estados de base es

$$H(|0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \equiv |+\rangle \quad (10.29)$$

$$H(|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \equiv |-\rangle \quad (10.30)$$

$$H(|+\rangle) = H\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle\right) = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) + \frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle) = |0\rangle \quad (10.31)$$

$$H(|-\rangle) = H\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle\right) = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) - \frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle) = |1\rangle \quad (10.32)$$

Una aplicación de la puerta de Hadamard es de usarla en el primer paso de la generación de números aleatorios. La representación de circuito de la puerta Hadamard es



Existen varias formas de fabricar una puerta de Hadamard que voy a solamente listar. La primera posibilidad puede ser el uso de 2 transmons que son un tipo de qubit cargado (pares de Cooper) que han sido inventados en 2007. Se puede también usar un sistema óptico donde los estados 0 o 1 son reemplazados por las polarizaciones vertical y horizontal. La puerta de Hadamard es en este caso un divisor de haz (50 : 50).

10.3.2 Matrices de Pauli

Las matrices de Pauli, comúnmente denotadas como X, Y, Z , o $\sigma_X, \sigma_Y, \sigma_Z$ en física, representan operaciones muy común. Son matrices unitarias de 2×2 , con la siguiente forma

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.33)$$

Podemos fácilmente verificar que $Z = -iXY$ o que $Y = iXZ$. La matriz de Pauli- X actúa sobre los vectores de base estándar intercambiándolos

$$X|0\rangle = |1\rangle \quad (10.34)$$

$$X|1\rangle = |0\rangle \quad (10.35)$$

En analogía con la computación clásica, X también se denomina NOT, ya que cambia 0 a 1 y viceversa. Esto también se conoce como una operación de cambio de bit. Por otro lado, la matriz de Pauli- Z actúa sobre la base estándar introduciendo un cambio de fase

$$Z|0\rangle = |0\rangle \quad (10.36)$$

$$Z|1\rangle = -|1\rangle \quad (10.37)$$

La matriz de Pauli- Z tiene el efecto de intercambiar los vectores $|+\rangle$ y $|-\rangle$

$$Z|+\rangle = Z\left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) = \frac{Z|0\rangle + Z|1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = |-\rangle \quad (10.38)$$

De manera similar, $Z|-\rangle = |+\rangle$. Así vemos que Z actúa como un cambio de bit en la base de Hadamard, mientras que actúa como un cambio de fase en la base estándar. Aplicar tanto un cambio de bit como un cambio de fase da $Y = iXZ$. Esta matriz, al actuar sobre los vectores de la base estándar, introduce un cambio de bit y un cambio de fase

$$Y|0\rangle = iXZ|0\rangle = iX|0\rangle = i|1\rangle \quad (10.39)$$

$$Y|1\rangle = -iXZ|0\rangle = -iX|1\rangle = -i|0\rangle \quad (10.40)$$



La puerta cuántica X tiene dos símbolos en circuitos.

Es fácil verificar que las matrices de Pauli tienen la buena propiedad de tener un cuadrado trivial, es decir $X^2 = Y^2 = Z^2 = \mathbb{1}$ lo que implica que la aplicación de la misma puerta dos veces nos da el estado inicial.

10.4 Teorema de no clonación

El teorema de no clonación establece que es imposible crear una copia independiente e idéntica de un estado cuántico desconocido cualquiera, una afirmación que tendrá implicaciones profundas en la computación cuántica, entre otras áreas. Imaginamos que existe un operador C que hace copias de un estado cuántico. Por ejemplo

$$C|1\rangle_A|0\rangle_B = |1\rangle_A|1\rangle_B \quad (10.41)$$

es decir que a copiado el estado del qubit A en el segundo qubit, B . También tenemos

$$C|0\rangle_A|0\rangle_B = |0\rangle_A|0\rangle_B \quad (10.42)$$

Vamos a demostrar que este operador de copia no puede existir. Si, esta operación existe deberíamos obtener

$$C|+\rangle_A|0\rangle_B = |+\rangle_A|+\rangle_B \quad (10.43)$$

pero

$$|+\rangle_A|+\rangle_B = \frac{1}{2}(|0\rangle_A + |1\rangle_A)(|0\rangle_B + |1\rangle_B) = \frac{1}{2}(|00\rangle_{AB} + |01\rangle_{AB} + |10\rangle_{AB} + |11\rangle_{AB})$$

y usando (10.13), obtenemos

$$C|+\rangle_A|0\rangle_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.44)$$

por otro lado podemos hacer este calculo de otra forma y usar el hecho que

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.45)$$

por lo tanto

$$C|+\rangle_A|0\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}}C(|0\rangle_A + |1\rangle_A)|0\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}}(C|0\rangle_A|0\rangle_B + C|1\rangle_A|0\rangle_B) \quad (10.46)$$

Usando las expresiones (10.41,10.42), obtenemos

$$C|+\rangle_A|0\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|0\rangle_B + |1\rangle_A|1\rangle_B) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.47)$$

Claramente esta expresión es diferente de (10.44), es decir que tenemos una contradicción lo que implica que esta operación de clonación es imposible.

Este teorema implica que no podemos conocer totalmente un qubit $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Es decir que no podemos completamente conocer α y β . En el caso contrario, podríamos clonar el estado.

11. Puerta NOT controlada

La puerta CNOT (*Controlled NOT*) es fundamental en la computación cuántica por su capacidad de generar estados entrelazados y formar parte de algoritmos cuánticos avanzados.

11.1 Definición

La puerta CNOT es una puerta cuántica de dos qubits, uno de los cuales actúa como qubit de control y el otro como qubit de destino. La operación que realiza esta puerta se puede describir de la siguiente manera:

- Si el qubit de control está en el estado $|0\rangle$, la puerta no cambia el estado del qubit de destino.
- Si el qubit de control está en el estado $|1\rangle$, la puerta aplica una operación X (puerta de Pauli-X) sobre el qubit de destino es decir una operación NOT.

La puerta CNOT se puede representar como una matriz 4×4 , actuando sobre un sistema de dos qubits:

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Donde el primer índice representa el estado del qubit de control y el segundo índice el estado del qubit de destino. La acción del CNOT es en resumen

$$\begin{aligned} \text{CNOT}(|00\rangle) &= |00\rangle \\ \text{CNOT}(|01\rangle) &= |01\rangle \\ \text{CNOT}(|10\rangle) &= |11\rangle \\ \text{CNOT}(|11\rangle) &= |10\rangle \end{aligned}$$

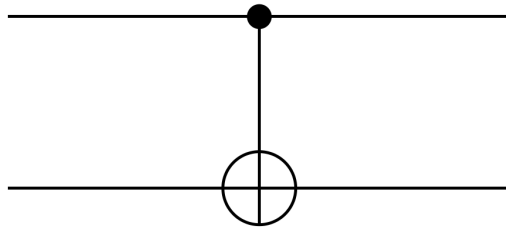
lo que podemos resumir en

$$\text{CNOT}(|x y\rangle) = |x y \oplus x\rangle \quad (11.1)$$

Por lo tanto, la acción de la matriz CNOT sobre un estado general de dos qubits $\alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$ es:

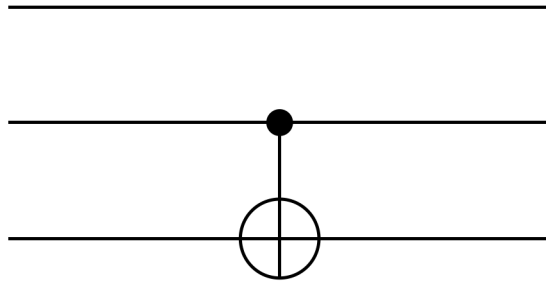
$$\text{CNOT}(\alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle) = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|11\rangle + \delta|10\rangle$$

La puerta CNOT se representa comúnmente en diagramas de circuitos cuánticos de la siguiente forma:



En este diagrama, el qubit de control está conectado al qubit de destino.

Obviamente podemos aplicar esta puerta a un estado de 3 qubits, por ejemplo, esta puerta



nos da la transformación

$$|x y z\rangle \rightarrow |x y z \oplus y\rangle \quad (11.2)$$

ya que el qubit de control está en el segundo, y actúa sobre el tercer.

Como cualquier puerta cuántica, la puerta CNOT es una operación unitaria, lo que significa que su matriz de evolución cumple:

$$\text{CNOT}^\dagger \cdot \text{CNOT} = \mathbb{1}_{4 \times 4} \quad (11.3)$$

Este hecho asegura que la evolución de un sistema cuántico bajo la operación de la puerta CNOT conserva la norma del estado cuántico, cumpliendo con la regla fundamental de la mecánica cuántica de conservación de la probabilidad.

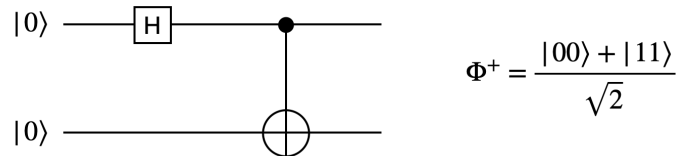
11.2 Estados de Bell

La puerta CNOT es esencial en la creación de estados entrelazados, tales como los estados de Bell. Considerando un sistema de dos qubits en el estado inicial $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$, si aplicamos la puerta CNOT obtenemos el siguiente estado entrelazado:

$$\text{CNOT} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

Este es uno de los estados de Bell, una de las formas más simples y fundamentales de entrelazamiento cuántico.

La construcción de este estado entrelazado puede ser obtenido a partir de una puerta de Hadamard y de una puerta CNOT



De forma detallada, la puerta de Hadamard actúa solamente sobre el primer qubit

$$H(|00\rangle) = |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle) \quad (11.4)$$

y la aplicación de la puerta CNOT sobre este estado nos da

$$\text{CNOT} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\text{CNOT}(|00\rangle) + \text{CNOT}(|10\rangle)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

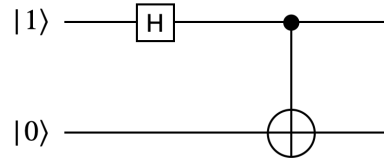
lo que corresponde a un estado entrelazado (10.18) comúnmente escrito Φ^+ . De la misma forma, existen 3 otros estados de Bell

$$\Phi^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) \quad (11.5)$$

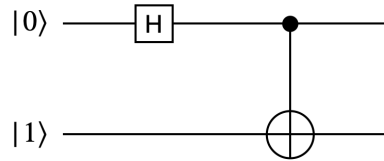
$$\Psi^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \quad (11.6)$$

$$\Psi^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \quad (11.7)$$

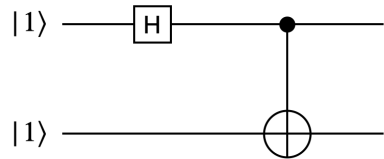
lo que pueden ser construidos de la misma forma a partir de una puerta de Hadamard y de una CNOT



$$\Phi^- = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}$$



$$\Psi^+ = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}$$



$$\Psi^- = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

Todos estos estados de Bell son estados entrelazados. Una forma de definir un estado entrelazado de 2 qubits es un estado que no se puede escribir como el producto de 2 qubits. De hecho el estado $|00\rangle + |01\rangle$ no es entrelazado, ya que se puede escribir

$$|00\rangle + |01\rangle = |0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \quad (11.8)$$

este estado es separable. Un estado no separable es entrelazado¹². Por ejemplo, no podemos separar el estado Φ^+

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \neq (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(\gamma|0\rangle + \delta|1\rangle) \quad (11.9)$$

$$\neq \alpha\gamma|00\rangle + \beta\gamma|10\rangle + \alpha\delta|01\rangle + \beta\delta|11\rangle \quad (11.10)$$

Estas 2 expresiones no puede ser iguales ya que deberíamos tener $\alpha\delta = 0$ y $\beta\gamma = 0$, lo que no nos puede llevar al estado de Bell. Ya que si $\alpha = 0$, perdemos el termino $|00\rangle$...

¹²Es la definición por los estados puros y no mixtos.

11.3 Medida del estado de Bell

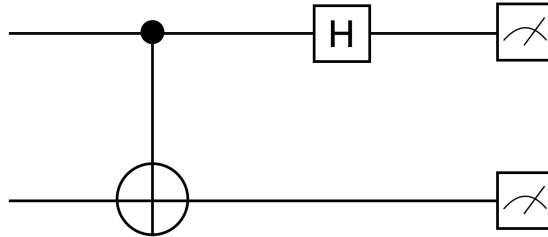
Queremos encontrar un protocolo experimental que nos permite distinguir entre los 4 estados de Bell. De forma genérica, cualquier estados ortogonales pueden ser distinguidos con una forma de circuitos cuántico. Obviamente los 4 estados de Bell son ortogonales. Por ejemplo

$$\langle \Phi^- | \Phi^+ \rangle = \frac{1}{2} (\langle 00 | - \langle 11 |) (|00\rangle + |11\rangle) \quad (11.11)$$

$$= \frac{1}{2} (\langle 00|00\rangle - \langle 11|00\rangle + \langle 00|11\rangle - \langle 11|11\rangle) \quad (11.12)$$

$$= \frac{1}{2} (1 - 0 + 0 - 1) = 0 \quad (11.13)$$

La medida es obtenida con el circuito siguiente



El símbolo final representa una medición. Por ejemplo, si comenzamos con el estado de Bell Φ^+ tenemos

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{CNOT}} \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{H}} \frac{|+0\rangle + |-0\rangle}{\sqrt{2}} = |00\rangle \quad (11.14)$$

De forma similar, tenemos

$$\frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{CNOT}} \frac{|00\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{H}} \frac{|+0\rangle - |-0\rangle}{\sqrt{2}} = |10\rangle \quad (11.15)$$

$$\frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{CNOT}} \frac{|11\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{H}} \frac{|-1\rangle + |+1\rangle}{\sqrt{2}} = |01\rangle \quad (11.16)$$

y finalmente

$$\frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{CNOT}} \frac{|01\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{H}} \frac{|+1\rangle - |-1\rangle}{\sqrt{2}} = |11\rangle \quad (11.17)$$

La medición final nos permite concluir cual era el estado de Bell. Por ejemplo, si medimos 0 y 0, sabemos que el estado inicial era Φ^+ .

11.4 Codificación superdensa

La codificación superdensa es un protocolo de comunicación cuántica que permite transmitir dos bits de información clásica utilizando un solo qubit en un sistema entrelazado. Este protocolo, propuesto por Bennett y Wiesner en 1992, aprovecha el fenómeno del entrelazamiento cuántico, que permite compartir información de manera eficiente. El protocolo de codificación superdensa requiere que dos partes (Alice y Bob) compartan un par de qubits entrelazados. Imaginamos que comparten el estado de Bell $|\Phi^+\rangle$. Este estado entrelazado está compartido antes de cualquier inicio de comunicación entre ellos. Cada uno (por ejemplo Alice) tiene un qubit que está entrelazado con el qubit del otro (por ejemplo Bob). Alice quiere enviar 2 bits. Existen 4 posibilidades, 00, 01, 10 o 11. Alice aplica una operación en su qubit (entrelazado) para codificar los 2 bits de información. En caso de querer enviar la información 00, Alice aplica la operación I sobre su qubit (entrelazado). Si quiere enviar los bits 01 debe aplicar la operación X sobre su qubit. Si quiere enviar la combinación 10, debe aplicar la operación Z a su qubit y finalmente si quiere enviar la información 11 debe aplicar $-iY$ o XZ a su qubit. Después de esta transformación, Alice envía su único qubit a Bob quien tiene un estado de Bell. Como lo hemos visto previamente, se puede hacer una medida para conocer el estado de Bell y por lo tanto deducir los bits que Alice quería enviar.

Por ejemplo, imaginemos que Alice quiere enviar los bits 10 a Bob:

- Alice y Bob comparten el estado de Bell inicial $|\Phi^+\rangle$.
- Para codificar 10, Alice aplica la operación Z en su qubit.
- El estado entrelazado cambia a $|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$. Recordamos que $Z|0\rangle = 0$ y $Z|1\rangle = -1$
- Alice envía su qubit a Bob, quien realiza una medición en la base de Bell y determina que el estado es $|\Phi^-\rangle$, decodificando así 10.

11.5 Teleportación cuántica

La teleportación cuántica es un proceso mediante el cual el estado cuántico de una partícula (como un qubit) puede ser transferido de un lugar a otro, sin mover físicamente la partícula en sí. Este proceso se basa en el entrelazamiento cuántico y permite la transferencia exacta de un estado cuántico a una partícula remota.

En el protocolo de teleportación, comenzamos con dos partículas entrelazadas, A y B, en posesión de Alice y Bob. Alice tiene una tercera partícula, C, cuyo estado desconocido desea teletransportar a Bob. El objetivo es transferir el estado de la

partícula C a la partícula B, que está en posesión de Bob, utilizando el entrelazamiento entre A y B.

Denotemos el estado que Alice quiere teletransportar como

$$|\psi\rangle_C = \alpha|0\rangle_C + \beta|1\rangle_C \quad (11.18)$$

donde α y β son números complejos tales que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Recordemos que Alice no puede medir α y β , así que no puede conocer el estado, pero quiere enviarlo a Bob. Además, Alice y Bob comparten un estado entrelazado que asumiremos como

$$|\Phi^+\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A|0\rangle_B + |1\rangle_A|1\rangle_B) \quad (11.19)$$

El estado inicial combinado del sistema (partículas C, A y B) es

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{CAB} &= |\psi\rangle_C \otimes |\Phi^+\rangle_{AB} = (\alpha|0\rangle_C + \beta|1\rangle_C) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A|0\rangle_B + |1\rangle_A|1\rangle_B) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha|0\rangle_C|0\rangle_A|0\rangle_B + \alpha|0\rangle_C|1\rangle_A|1\rangle_B + \beta|1\rangle_C|0\rangle_A|0\rangle_B + \beta|1\rangle_C|1\rangle_A|1\rangle_B) \end{aligned}$$

Expandimos $|\Psi\rangle_{CAB}$ en términos de los estados de Bell, sabiendo que

$$|\Phi^\pm\rangle_{CA} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_C|0\rangle_A \pm |1\rangle_C|1\rangle_A) \quad (11.20)$$

$$|\Psi^\pm\rangle_{CA} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_C|1\rangle_A \pm |1\rangle_C|0\rangle_A) \quad (11.21)$$

lo que nos da

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{CAB} &= \frac{1}{2} \left(|\Phi^+\rangle_{CA} (\alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B) + |\Phi^-\rangle_{CA} (\alpha|0\rangle_B - \beta|1\rangle_B) \right. \\ &\quad \left. + |\Psi^+\rangle_{CA} (\beta|0\rangle_B + \alpha|1\rangle_B) + |\Psi^-\rangle_{CA} (\beta|0\rangle_B - \alpha|1\rangle_B) \right) \end{aligned} \quad (11.22)$$

Alice mide las partículas C y A en la base de Bell. Dependiendo del resultado de su medición, el estado de la partícula B de Bob colapsará en uno de los siguientes:

- $\alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B$, si el resultado de la medición es $|\Phi^+\rangle_{CA}$
- $\alpha|0\rangle_B - \beta|1\rangle_B$, si el resultado de la medición es $|\Phi^-\rangle_{CA}$
- $\beta|0\rangle_B + \alpha|1\rangle_B$, si el resultado de la medición es $|\Psi^+\rangle_{CA}$
- $\beta|0\rangle_B - \alpha|1\rangle_B$, si el resultado de la medición es $|\Psi^-\rangle_{CA}$

Cada resultado corresponde a un estado de Bell específico para C y A . Finalmente, Alice comunica su resultado de la medición de Bell a Bob usando dos bits clásicos

- 00 si el resultado de la medición es $|\Phi^+\rangle_{CA}$
- 01 si el resultado de la medición es $|\Phi^-\rangle_{CA}$
- 10 si el resultado de la medición es $|\Psi^+\rangle_{CA}$
- 11 si el resultado de la medición es $|\Psi^-\rangle_{CA}$

Con base en los dos bits que Alice envía, Bob aplica la operación de Pauli adecuada a su partícula B para recuperar $|\psi\rangle$

- Si el resultado de Alice es $|\Phi^+\rangle_{CA}$, la partícula B de Bob ya está en el estado $|\psi\rangle_B = \alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B$, por lo que no necesita ajuste (operación de identidad I).
- Si el resultado de Alice es $|\Phi^-\rangle_{CA}$, Bob aplica Z para invertir la fase

$$Z(\alpha|0\rangle_B - \beta|1\rangle_B) = \alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B,$$

recuperando $|\psi\rangle$.

- Si el resultado de Alice es $|\Psi^+\rangle_{CA}$, Bob aplica X

$$X(\beta|0\rangle_B + \alpha|1\rangle_B) = \alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B$$

obteniendo nuevamente $|\psi\rangle$.

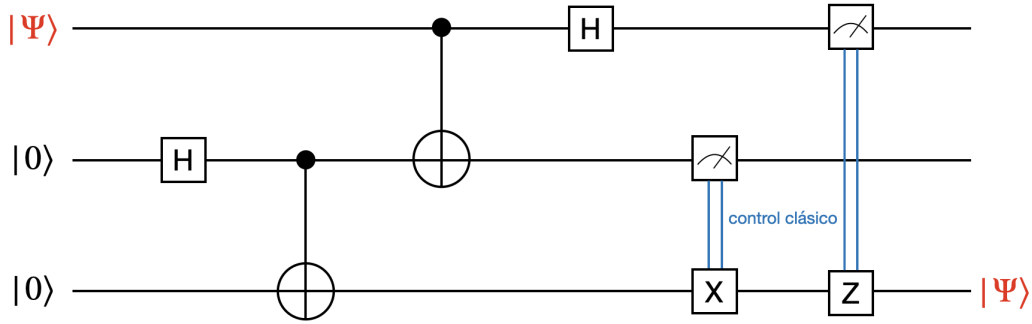
- Si el resultado de Alice es $|\Psi^-\rangle_{CA}$, Bob aplica $XZ = iY$, combinando un cambio de bit y un cambio de fase

$$XZ(\beta|0\rangle_B - \alpha|1\rangle_B) = \alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B$$

Cada una de estas operaciones asegura que el estado final de la partícula B de Bob coincida con el estado original $|\psi\rangle$ que Alice quería enviar.

Es importante notar que la teleportación cuántica no permite la transmisión de información más rápida que la luz, ya que el proceso requiere el envío de información clásica entre Alice y Bob. Sin embargo, esta técnica es fundamental para tecnologías de comunicación cuántica y cómputo cuántico, donde es esencial transmitir estados cuánticos de manera segura y sin necesidad de transferir físicamente los qubits.

Para terminar esta sección, podemos escribir un circuito que resume la teleportación cuántica



Considerando $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, tenemos en la entrada el estado

$$\frac{\alpha|000\rangle + \beta|100\rangle}{\sqrt{2}}$$

Después de las puertas, H , CNOT, CNOT y H obtenemos

$$\frac{\alpha(|000\rangle + |100\rangle + |011\rangle + |111\rangle) + \beta(|010\rangle + |001\rangle - |110\rangle - |101\rangle)}{2}$$

lo que se puede escribir

$$\frac{|00\rangle}{2}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) + \frac{|01\rangle}{2}(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) + \frac{|10\rangle}{2}(\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle) + \frac{|11\rangle}{2}(\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)$$

Se aplica sobre este estado, la puerta X o Z según el resultado de la medida. Si en el qubit 1 o 2 se mide 1 se aplica la puerta correspondiente, si el resultado es 0, no se aplica. Por lo tanto si se mide 0,0, obtenemos directamente el estado $|\Psi\rangle$. Si se mide 0,1, se debe aplicar la puerta X sobre el estado $\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$ lo que nos da también $|\Psi\rangle$...

12. Criptografía cuántica

La criptografía cuántica representa un enfoque para la comunicación segura, utilizando los principios de la mecánica cuántica para abordar las vulnerabilidades inherentes en los métodos criptográficos clásicos. En el corazón de la criptografía cuántica se encuentra el concepto de distribución de claves cuánticas (QKD, por sus siglas en inglés), un protocolo diseñado para intercambiar de manera segura las claves criptográficas entre dos partes utilizando las propiedades fundamentales de las partículas cuánticas. A diferencia de los métodos criptográficos clásicos, que dependen de la complejidad matemática para asegurar las claves, QKD garantiza la seguridad a través de las leyes físicas de la mecánica cuántica, lo que lo hace teóricamente inmune a los ataques que explotan las limitaciones computacionales. Antes de profundizar en QKD, primero estudiemos un esquema de cifrado como la libreta (cuántica) de un solo uso.

12.1 Libreta (cuántica) de un solo uso

Supongamos que Alice desea enviar de forma segura un bit b a Bob. Ella y Bob comparten otro bit k , la clave, que es elegida aleatoriamente para ser 0 o 1, cada uno con probabilidad $\frac{1}{2}$. Alice calcula el bit del mensaje $m = b \oplus k$, donde \oplus denota la suma módulo dos, y lo envía a Bob. Como él conoce k , puede calcular $b = m \oplus k$. Sin embargo, un espía (a quien llamaremos Eve) que no conoce k no puede aprender nada sobre b , ya que b y m tienen información mutua cero. Para enviar varios bits, Alice y Bob pueden repetir este procedimiento, utilizando un nuevo bit de clave aleatoria para cada bit del mensaje. Por ejemplo, si el mensaje es

$$b = 10100110$$

necesitamos usar una clave de la misma longitud

$$k = 00110111$$

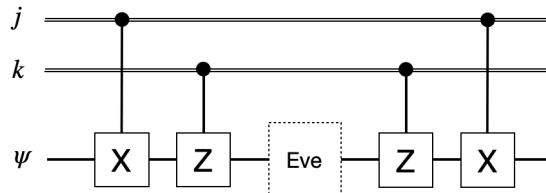
El mensaje cifrado es

$$m = b \oplus k = 10010001$$

Bob recibe el mensaje 10010001 y si tiene la misma clave k , puede descifrar el mensaje realizando la misma operación

$$m \oplus k = 10100110 \equiv b$$

El canal cuántico privado es un análogo cuántico de este protocolo en el que la clave sigue siendo clásica, pero el canal se utiliza para enviar estados cuánticos¹³. En el canal cuántico privado, Alice y Bob deben compartir dos bits clásicos j y k para que Alice envíe su qubit. Este circuito resume su protocolo.



Alice aplica el operador unitario $Z^k X^j$ a su estado $|\psi\rangle$ y envía el resultado a Bob. Mientras tanto, Eve puede interceptar el estado, pero como no conoce j ni k , no podrá

¹³Esto difiere del cifrado cuántico de Vernam, en el que la clave también es un estado cuántico

encontrar el mensaje. Eve no puede aprender nada sobre el estado. Aunque pueda destruir el estado o cambiarlo de alguna manera, no puede aprender nada sobre él. Suponiendo que no haga nada, Bob recibirá el estado $Z^k X^j |\psi\rangle$. Como él conoce los valores de j y k , puede aplicar la operación inversa $X^j Z^k$ para recuperar el estado original. Si Alice quiere enviar a Bob n qubits, pueden repetir el procedimiento independientemente para cada qubit, utilizando un total de $2n$ bits clásicos aleatorios como clave.

Veamos un ejemplo simple. Supongamos que Alice quiere enviar un solo qubit $|\psi\rangle$ a Bob de forma segura utilizando una libreta cuántica de un solo uso. Supongamos que $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, donde α y β son números complejos que cumplen $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Primero, Alice elige aleatoriamente dos bits clásicos como clave para el cifrado. Supongamos que elige

$$k_1 = 1 \quad \text{y} \quad k_2 = 0$$

donde k_1 controla una inversión de bit (con una operación de Pauli X) mientras que k_2 controla una inversión de fase (operación Pauli Z). Entonces, Alice aplica una operación cuántica basada en los valores de k_1 y k_2 . Esto significa que, como $k_1 = 1$, aplica el operador X y, como $k_2 = 0$, no aplica el operador Z . Recuerde que la operación de inversión de bit X cambia $|0\rangle$ a $|1\rangle$ y $|1\rangle$ a $|0\rangle$. Después de aplicar X , el estado $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ se convierte en:

$$X|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$$

Este estado transformado ahora está cifrado, y Alice lo envía a Bob. Después de que Bob lo recibe, y como conoce la clave $(k_1, k_2) = (1, 0)$, puede deshacer las operaciones que Alice aplicó. Como $k_1 = 1$, aplica X nuevamente para deshacer la inversión de bit. Aplicando X a $\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$ devuelve el estado original

$$X(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = |\psi\rangle$$

Veamos un segundo ejemplo, con un estado de dos qubits

$$|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle \tag{12.1}$$

donde α, β, γ , y δ son coeficientes complejos tales que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$. Como antes, necesitamos elegir una clave. Para cada qubit, Alice necesita dos bits clásicos para determinar las operaciones de Pauli. Para el primer qubit, Alice elige los bits de clave $k_{1,1} = 1$ y $k_{1,2} = 1$. Mientras que para el segundo qubit, Alice elige los bits de clave $k_{2,1} = 0$ y $k_{2,2} = 1$. Para el primer qubit, $k_{1,1} = 1$ significa aplicar la operación X ,

mientras que $k_{1,2} = 1$ significa aplicar la operación Z . Para el segundo qubit, $k_{2,1} = 0$ significa no aplicar la operación X y $k_{2,2} = 1$ significa aplicar la operación Z . Así que las operaciones de cifrado generales para cada qubit son, ZX para el primer qubit y Z para el segundo.

Después de aplicar estas transformaciones, el estado cifrado se convierte en

$$|\psi_{\text{encriptado}}\rangle = -\alpha|10\rangle + \beta|11\rangle + \gamma|00\rangle - \delta|01\rangle \quad (12.2)$$

Luego, Alice envía el estado cifrado $|\psi_{\text{encriptado}}\rangle$ a Bob a través de un canal cuántico, y Bob necesita descifrar el mensaje usando la misma clave. Entonces, en el primer qubit, aplicará XZ , mientras que en el segundo qubit, aplicará Z . Este proceso asegura que Bob reciba el estado original exactamente como Alice lo envió, mientras que cualquiera que intercepte $|\psi_{\text{encriptado}}\rangle$ vería un estado completamente desordenado sin información sobre $|\psi\rangle$.

Esta forma cuántica de libreta es mejor que la forma clásica, ya que Eve no puede copiar el mensaje y esperar de poder encontrar la clave. La interceptación del mensaje cambia el mensaje y por lo tanto podemos definir un protocolo para asegurarse que no había cambio en nuestro mensaje.

12.2 Distribución de claves cuánticas

Hemos visto un ejemplo de criptografía de clave secreta o simétrica, en la que dos partes cifran y descifran sus mensajes usando la misma clave compartida. Las dos partes deben compartir de alguna manera la clave (físicamente, por correo electrónico o carta) antes de usarla para una comunicación segura. La desventaja es que nunca se sabe si alguien robó la clave durante el proceso de compartirla, lo cual es una desventaja significativa de este sistema criptográfico. Por otro lado, tenemos la distribución de clave pública o asimétrica. En este caso, la clave tiene dos partes: pública y privada. Los datos cifrados con la clave pública solo pueden ser descifrados con la clave privada, y los datos cifrados con la clave privada solo pueden resolverse con la clave pública.

En 1984, Charles Bennett y Gilles Brassard publicaron un protocolo llamado BB84, en honor a los autores y al año de publicación. Es uno de los protocolos cuánticos más destacados, y todos los demás protocolos se consideran variantes del BB84.

El protocolo BB84 permite a los dos partes, Alice y Bob, establecer una clave compartida y segura. La seguridad se basa en las propiedades fundamentales de los qubits, específicamente en el hecho de que no se pueden medir sin alterarlos cuando están preparados en estados no ortogonales. En el protocolo BB84, Alice envía qubits a Bob y utilizan dos bases diferentes para codificar y medir estos qubits:

- Puede usar la base computacional, representada por los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$.

- Puede usar la base de Hadamard (o diagonal), representada por los estados $|+\rangle = \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$ y $|-\rangle = \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$.

Primero, Alice selecciona el estado de cada qubit de forma aleatoria, es decir

- Elige un bit aleatorio (0 o 1) para codificar.
- Elige una base aleatoria (computacional o de Hadamard) para codificar el bit:
 - En la base computacional (C), Alice codifica el 0 como $|0\rangle$ y el 1 como $|1\rangle$.
 - En la base de Hadamard (H), codifica el 0 como $|+\rangle$ y el 1 como $|-\rangle$.

Por ejemplo, Alice podrá tener la tabla siguiente

<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>C</i>
0	1	1	0	1	0	0	1	1	0	0
$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ -\rangle$	$ +\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$	$ +\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$	$ 0\rangle$

Alice envía cada qubit a Bob, uno por uno, a través de un canal cuántico. Durante esta transmisión, cualquier intento de interceptación por Eve alterará los qubits y será detectable.

Al recibir cada qubit, Bob elige una base (computacional o de Hadamard) de forma aleatoria para medirlo. Como no conoce las elecciones de bases de Alice, sólo tiene un 50% de probabilidad de coincidir con su base para cada qubit. Es decir, que Si la base de Bob coincide con la de Alice, él mide el qubit correctamente y obtiene el mismo valor de bit que Alice envió. Pero si su base no coincide con la de Alice, obtiene un resultado aleatorio. Por lo tanto, tendrá 75% de resultados correctos. Bob podrá tener

<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>H</i>	<i>C</i>
1	1	1	0	1	0	1	1	0	0	0
$ -\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$	$ +\rangle$	$ 0\rangle$

Después de enviar todos los qubits, Alice y Bob se comunican a través de un canal clásico público. Revelan sus elecciones de bases para cada qubit, pero no los resultados de las mediciones. Es decir que Alice comunica

<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>C</i>
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

y Bob comunica

<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>H</i>	<i>C</i>
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

Descartan los bits en los que usaron bases diferentes, quedándose sólo con aquellos en los que ambos usaron la misma base. Es decir que guardan

	<i>C</i>			<i>C</i>	<i>H</i>		<i>C</i>		<i>H</i>	<i>C</i>
--	----------	--	--	----------	----------	--	----------	--	----------	----------

Los bits restantes (donde Alice y Bob usaron la misma base) forman la clave cruda. Es decir que concluyen cada uno que la clave debe ser, 110100

	1			1	0		1		0	0
--	---	--	--	---	---	--	---	--	---	---

Para verificar la presencia de un espía, Alice y Bob comparan un subconjunto de los bits restantes a través del canal público. Si detectan demasiados errores (más de lo esperado debido al ruido cuántico), abortan el protocolo, ya que indica que Eve podría haber interceptado los qubits. Si la tasa de error es baja, continúan. En nuestro caso, si comparan, por ejemplo un bit de cada dos, encontrarán que ambos tienen 100.

Imaginamos que Eve estaba interceptando la comunicación y por lo tanto ha hecho lo que Bob debería haber hecho, es decir elegir una base y hacer una medición. Eve tendría, como Bob, 75% de sucesos.

<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>H</i>
0	1	0	0	1	0	0	1	0	1	0
$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ +\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$

Luego Eve envía estos qubits a Bob. Bob piensa que el mensaje ha sido enviado por Alice y elige su base para hacer la medida. Vamos a considerar la misma base que Bob ha elegido en nuestro caso previo sin Eve

<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>C</i>	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>H</i>	<i>C</i>
1	1	0	0	1	0	0	1	0	1	1
$ -\rangle$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ +\rangle$	$ -\rangle$	$ 1\rangle$

Como antes, Alice y Bob publican la base que han elegido y como es la misma que en el primer caso, llegan a la conclusión que la base que tienen en común es

	<i>C</i>			<i>C</i>	<i>H</i>		<i>C</i>		<i>H</i>	<i>C</i>
--	----------	--	--	----------	----------	--	----------	--	----------	----------

Para Alice, eso corresponde a

	1			1	0		1		0	0
--	---	--	--	---	---	--	---	--	---	---

aunque para Bob corresponde a

	1			1	0		1		1	1
--	---	--	--	---	---	--	---	--	---	---

Si de nuevo comparan un bit de cada dos, Alice podrá anunciar en canal público que tiene 100 aunque Bob tendrá 101. Es decir en este ejemplo, 33% de errores.

Este mecanismo de detección hace que el BB84 sea un protocolo poderoso para la distribución de claves seguras, ya que cualquier intento de interceptación será evidente en la tasa de error de la clave final.