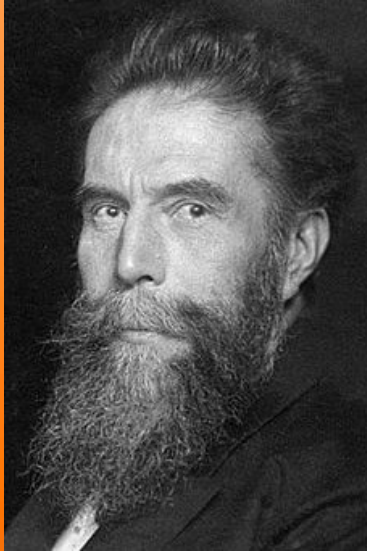


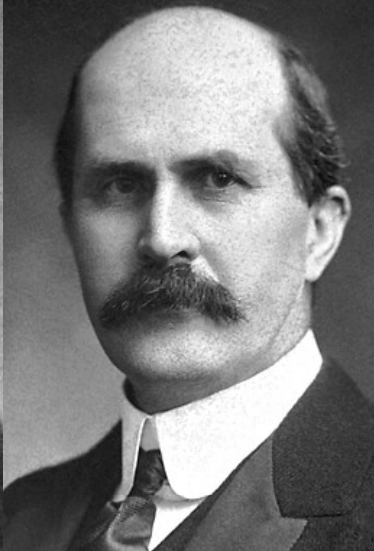
24- PROPIEDADES ONDULATORIAS DE LA LUZ: DIFRACCIÓN DE RAYOS X MEDIANTE CRISTALES



**Wilhelm
Conrad
Röntgen**



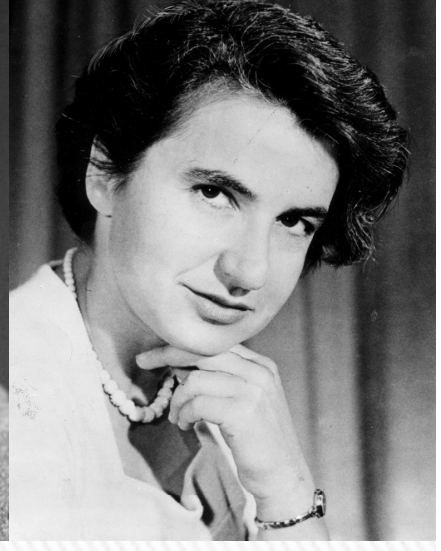
Max von Laue



**William Henry
Bragg**

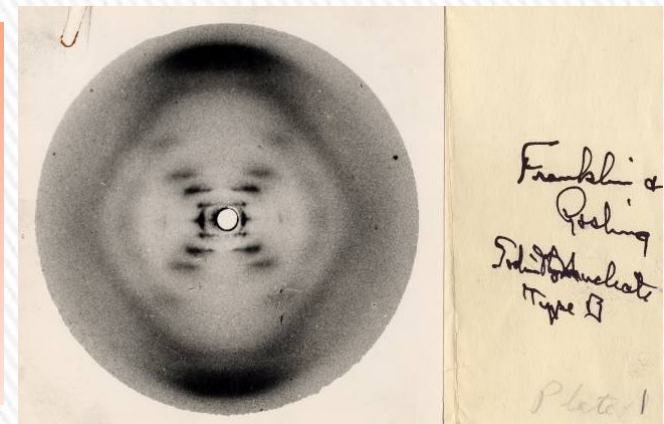


**William
Lawrence Bragg**



**Rosalind
Franklin**

La **Fotografía 51** es el nombre dado a una imagen del ADN obtenida por Raymond Gosling, mediante difracción de rayos X en 1952 y que fue una evidencia fundamental² para identificar la estructura del ADN. La fotografía fue tomada por Gosling, entonces estudiante de doctorado supervisado por Rosalind Franklin mientras trabajaba en el King's College de Londres.



DIFRACCIÓN DE RAYOS X MEDIANTE CRISTALES

En principio, es posible determinar λ de cualquier onda electromagnética, si se dispone de una rejilla de difracción con un espaciamiento entre rendijas adecuado (del orden de λ).

Los rayos X, descubiertos en el año 1895 por Wilhelm Roentgen, son ondas electromagnéticas de una longitud de onda muy reducida (del orden de 0,1 nm). Sería imposible, utilizando el proceso de corte para construir una rejilla con un espaciamiento tan pequeño.

Sin embargo, el espaciamiento atómico en un sólido es de aproximadamente 0,1nm. En el año de 1913, Max von Laue (1879-1960) sugirió que la organización normal de los átomos en un cristal pudiera funcionar como una rejilla de difracción tridimensional para los rayos X.

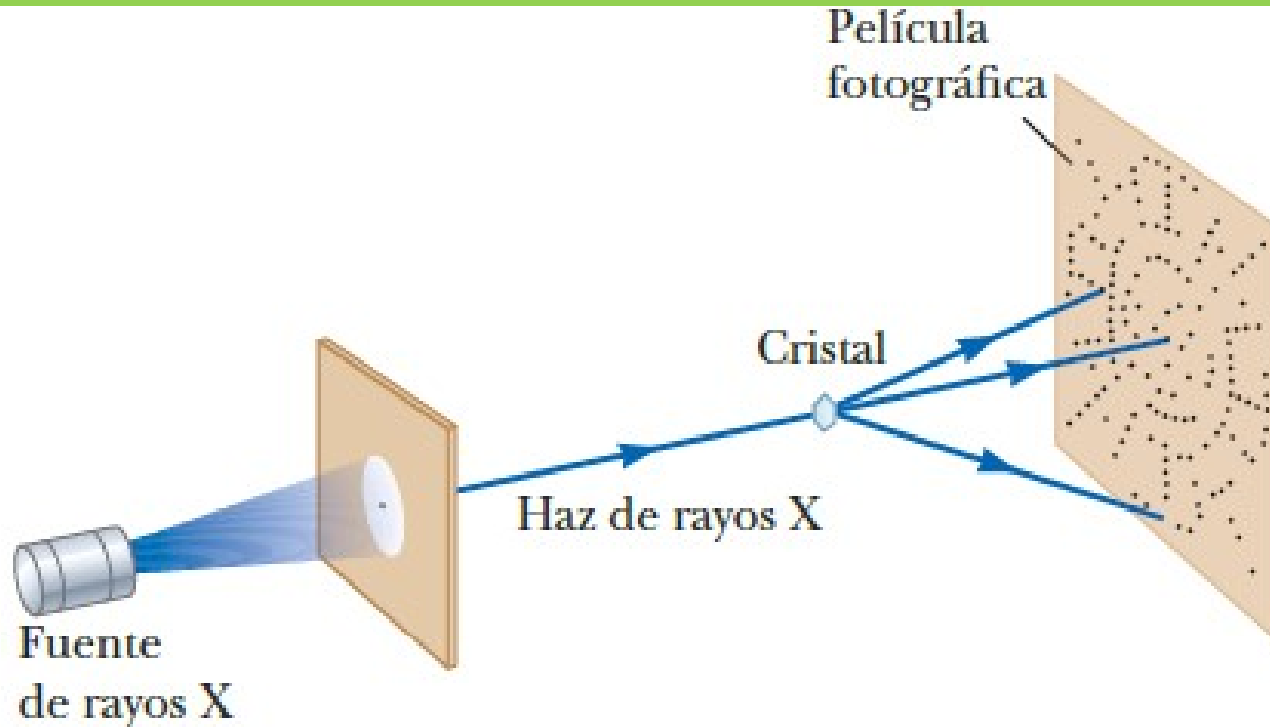
Experimentos posteriores confirmaron esta predicción.

Los patrones de difracción de cristales son complejos debido a la naturaleza tridimensional de la estructura cristalina.

A pesar de esto, la difracción de los rayos X ha demostrado ser una técnica invaluable para aclarar estas estructuras y para un mejor discernimiento de la estructura de la materia y desempeña un importante papel en el estudio de estructuras de líquidos y de moléculas orgánicas.

Ha sido una de las principales técnicas experimentales para establecer la estructura de doble hélice del DNA y lograr avances ulteriores en genética molecular.

DIFRACCIÓN DE RAYOS X MEDIANTE CRISTALES



La figura muestra un arreglo experimental para la observación de la difracción de los rayos X mediante un cristal.

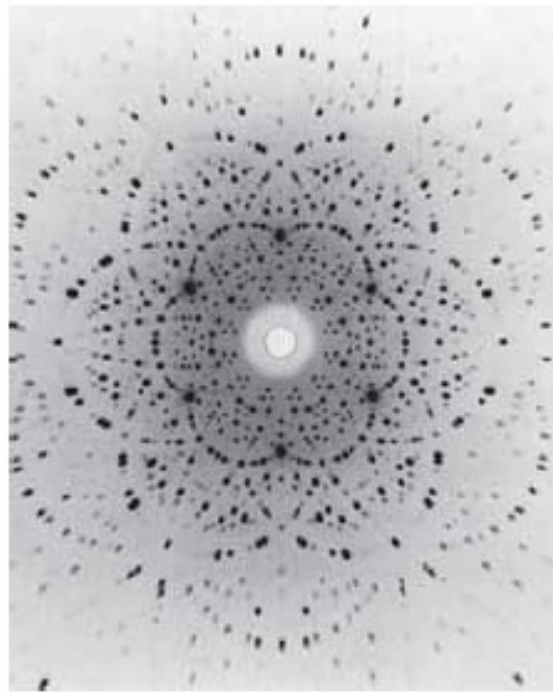
Sobre el cristal incide un haz colimado de rayos X monocromáticos.

Los rayos difractados son muy intensos en ciertas direcciones, que corresponden a la interferencia constructiva de ondas reflejadas de las capas de átomos del cristal.

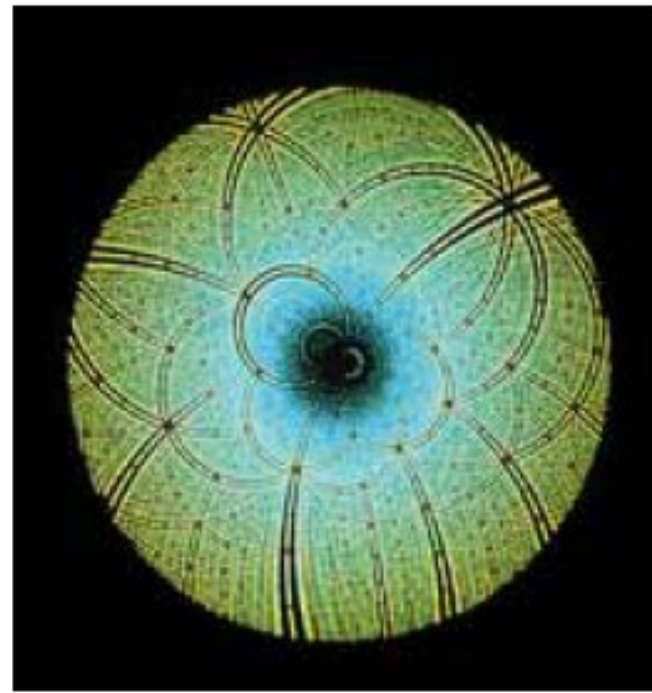
Los rayos difractados, que pueden ser detectados sobre una película fotográfica, forman un arreglo de puntos conocido como **patrón de Laue**.

Es posible deducir la estructura cristalina al analizar las posiciones relativas y las intensidades de los diversos puntos en dicho patrón.

DIFRACCIÓN DE RAYOS X MEDIANTE CRISTALES



Used with permission of Eastman Kodak Company



a

b

a) Un patrón Laue de un cristal simple del mineral berilio (aluminio-silicato de berilio).

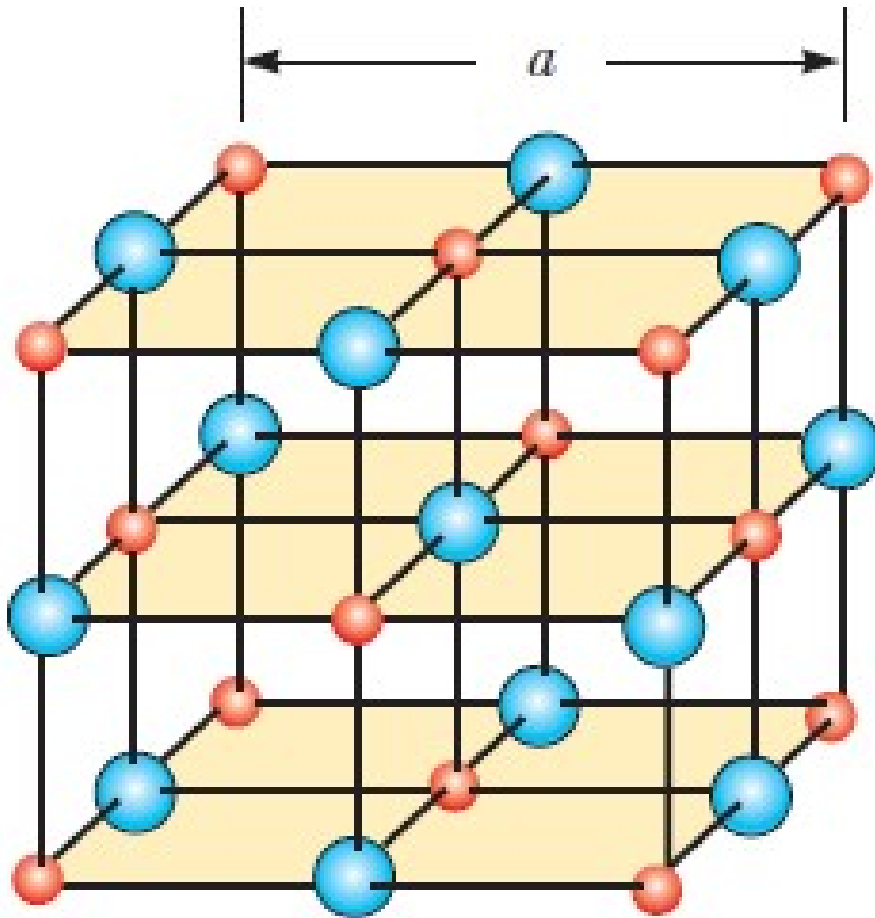
Cada punto representa un lugar de interferencia constructiva.

b) Patrón Laue de la enzima Rubisco, producida mediante un espectro de rayos X de banda ancha.

Esta enzima está presente en las plantas y forma parte de la fotosíntesis.

El patrón Laue es utilizado para determinar la estructura cristalina del Rubisco.

DIFRACCIÓN DE RAYOS X MEDIANTE CRISTALES



La figura muestra la organización de los átomos en un cristal de cloruro de sodio (NaCl).

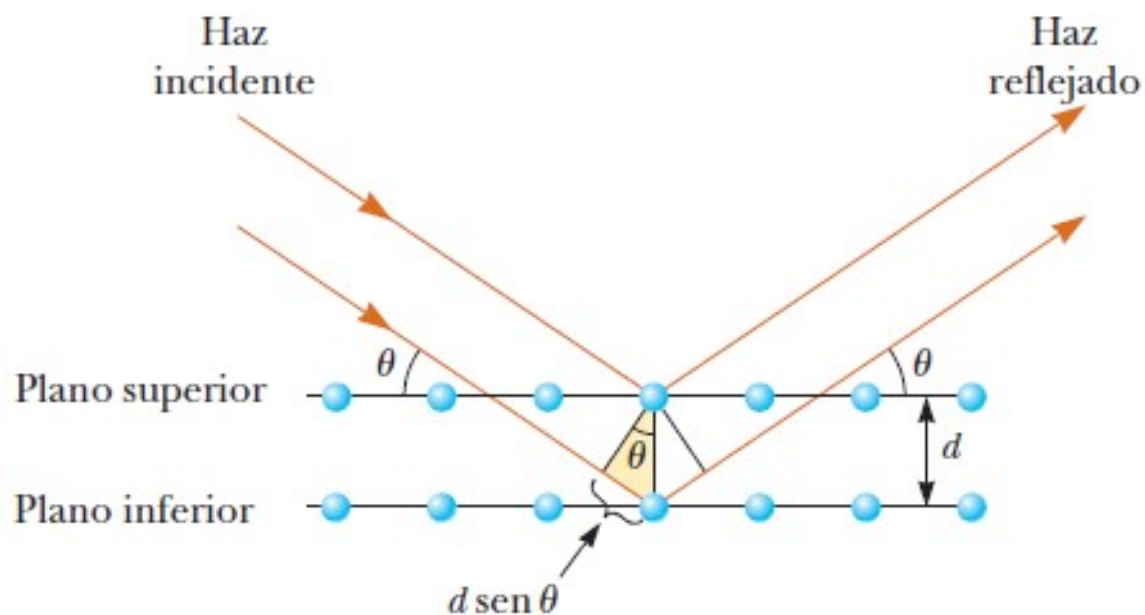
Las esferas de color azul representan iones Cl, y las de color rojo iones Na. Cada celda unitaria (el sólido geométrico que se repite en todo el cristal) es un cubo de arista a .

La longitud de la arista del cubo (a) vale 0,563 nm.

Un examen cuidadoso de la estructura del NaCl muestra que los iones yacen en planos discretos (las áreas sombreadas de la figura).



DIFRACCIÓN DE RAYOS X MEDIANTE CRISTALES



Supongamos que un rayo X incidente forma un ángulo θ con uno de los planos. El rayo puede reflejarse tanto del plano superior como del inferior. El rayo reflejado del plano inferior se desplaza más que el rayo reflejado proveniente del plano superior. La diferencia en la trayectoria efectiva es igual a $2d \sin \theta$.

Los dos haces se refuerzan (*interferencia constructiva*) cuando esta diferencia de trayectoria es igual a algún múltiplo entero de λ .

Esto también ocurre para la reflexión de toda la familia de planos paralelos.

La condición para una interferencia *constructiva* (*máximos en el rayo reflejado*) es igual a: $2d \sin \theta = m\lambda$ $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ **condición de Bragg**

Esta condición se conoce como **Ley de Bragg**, en honor a **W.H. Bragg** y **W.L. Bragg**, quienes fueron los primeros en deducir la relación.

Si se mide la longitud de onda y el ángulo de difracción, es posible calcular el espaciamiento entre los planos atómicos.

DIFRACCIÓN DE RAYOS X MEDIANTE CRISTALES

La difracción de rayos X se utilizó originalmente con cristales inorgánicos relativamente simples, se ha aplicado también con éxito espectacular a moléculas biológicas, que pueden cristalizar, tales como proteínas y ácidos nucleicos.

Por ejemplo, en 1960, Max Perutz comparó las posiciones e intensidades de miles de manchas de hemoglobina y estableció el primer modelo tridimensional de la molécula de la hemoglobina.

Halló así que esta proteína portadora de oxígeno de la sangre consta de unos 10.000 átomos unidos en cuatro cadenas, todas ellas de forma helicoidal y con varios codos.

Además, Perutz demostró cómo varía la forma de la hemoglobina cuando gana o pierde oxígeno.

Otro progreso importante en biología basado en parte en estudios de rayos X fue el descubrimiento por Crick y Watson en 1953 de que el ácido nucleico ADN tiene estructura de doble hélice.



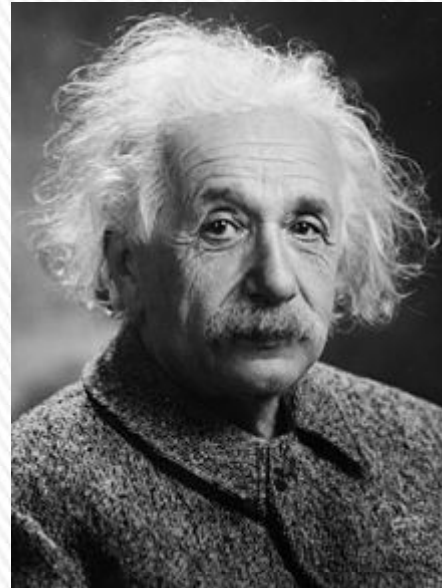
La estructura helicoidal del ADN es evidente cuando su figura de difracción se compara con la que sería de esperar a partir de una configuración de hélices.

La científica británica Rosalind Franklin obtuvo esta revolucionaria imagen de difracción de rayos X del DNA en 1953. Las bandas oscuras dispuestas en cruz de la figura superior suministraron la primera prueba de la estructura helicoidal de la molécula de DNA.

24- FÍSICA MODERNA



Max Planck
(1858-1947).
Nobel de Física 1918
Considerado como el fundador de la teoría cuántica (1900)



Albert Einstein
(1879-1955).
Nobel de Física 1921
Autor de la Teoría de la Relatividad,
explicación del efecto fotoeléctrico.



Louis Víctor de Broglie
(1892-1987).
Nobel de Física 1929
Ondas de materia,
descubrimiento ondulatorio del electrón.

Niels Bohr
(1885-1962).
Nobel de Física 1922
Estructura del átomo y mecánica cuántica

LÍMITES DE LA FÍSICA CLÁSICA

Hacia fines del siglo XIX, muchos consideraban la física como una ciencia acabada. Se comprendían bien las leyes del movimiento, de la termodinámica y del electromagnetismo, y parecía que tan sólo problemas experimentales y de cálculo podrían dificultar ulteriores progresos.

Sin embargo surgieron una serie de problemas que no podían explicarse...

1) El problema del éter y la incompatibilidad de la mecánica clásica y el electromagnetismo (la no invarianza de las ecuaciones de Maxwell ante las transformaciones galileanas)

2) Problema de la estabilidad del átomo, en su evolución de los modelos del pastel de pasas (electrón descubierto en 1897) y el modelo planetario de Rutherford (que con los experimentos de Geiger y Marsden en 1911 bajo supervisión de Rutherford descubren el núcleo atómico).

3) La catástrofe ultravioleta. De acuerdo a la teoría clásica de la radiación del cuerpo negro, de Rayleigh-Jeans se predice que la radiación crece indefinidamente con la frecuencia, lo cual contradecía los resultados experimentales.

4) El efecto fotoeléctrico-

Sin embargo transcurridos sólo 20 años del siglo XX, la descripción del mundo físico se vio profundamente conmovida.

Los problemas no resueltos en 1900 sólo resultaron explicables mediante hipótesis drásticas sin precedentes históricos. 

Hacia 1912 los trabajos de Max Planck, Niels Bohr y Albert Einstein proporcionaron una nueva imagen del mundo.

CUANTIZACIÓN DE LA ENERGÍA

Cuando se examina la emisión, absorción y dispersión de la radiación electromagnética, descubrimos un aspecto totalmente distinto de la luz. Vemos que la energía de una onda electromagnética está **cuantizada**: se emite y absorbe en forma de paquetes semejantes a partículas de energía definida, llamados **fonones o cuantos**.

La energía de un fotón es proporcional a la frecuencia de la radiación. También la energía interna de los átomos está cuantizada. Para una determinada clase de átomo individual, la energía no puede tener un valor cualquiera; sólo son posibles valores discretos, llamados **niveles de energía**.

Estas consideraciones nos llevan al umbral de la **mecánica cuántica**, que *implica cambios radicales en nuestras ideas sobre la naturaleza de la radiación electromagnética y de la materia misma.*



COMPORTAMIENTO CORPUSCULAR DE LAS ONDAS ELECTROMAGNÉTICAS

¿Cómo se produce la luz?

Heinrich Hertz produjo ondas electromagnéticas al usar oscilaciones en un circuito resonante $L-C$.

Usó frecuencias del orden de 10^8 Hz, pero la luz visible tiene frecuencias del orden de 10^{15} Hz, es decir, mucho mayores que cualquier frecuencia que pueda alcanzarse con los circuitos electrónicos convencionales.

Al final del siglo XIX, algunos físicos especulaban que las ondas en este intervalo de frecuencias podrían ser producidas por cargas eléctricas oscilantes dentro de átomos individuales.

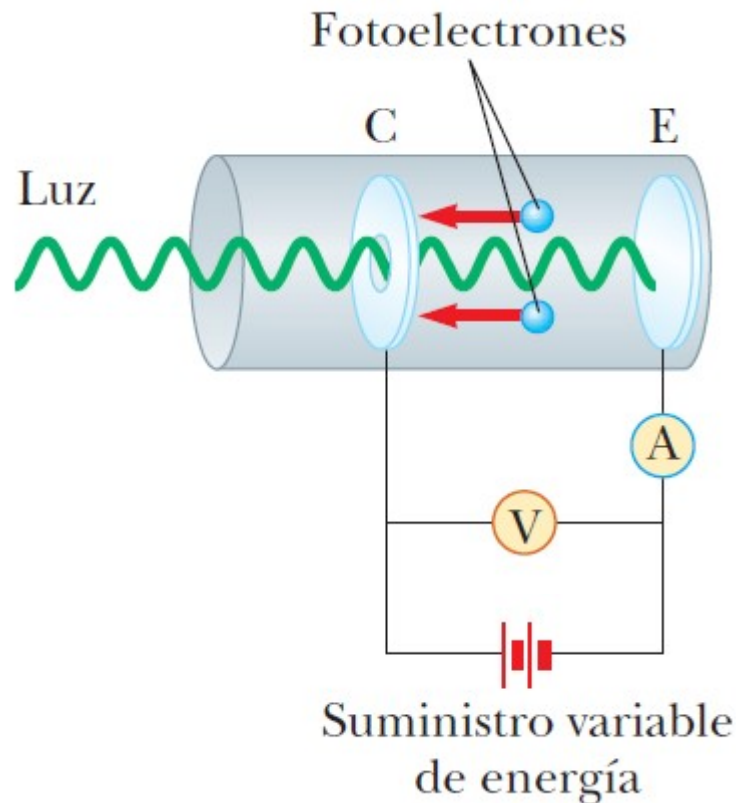
Sin embargo, sus hipótesis no explicaban algunos resultados experimentales clave.

Entre los grandes desafíos que enfrentaban los físicos en 1900 estaban cómo explicar:

*los espectros atómicos de líneas,
y el efecto fotoeléctrico*



EFEECTO FOTOELÉCTRICO



En 1887 Heinrich Hertz descubre este fenómeno: la luz que incide sobre ciertas superficies metálicas provoca la emisión de electrones de éstos (**fotocorrientes**).

Un tubo de vidrio al vacío (fotocelda), contiene una placa metálica E (el emisor) conectado a la terminal negativa de una fuente de energía variable.

Otra placa metálica, C (colector), se mantiene a un potencial positivo mediante la fuente de energía.

Cuando el tubo se conserva en la oscuridad, el amperímetro lee cero, lo que indica que no hay corriente en el circuito.

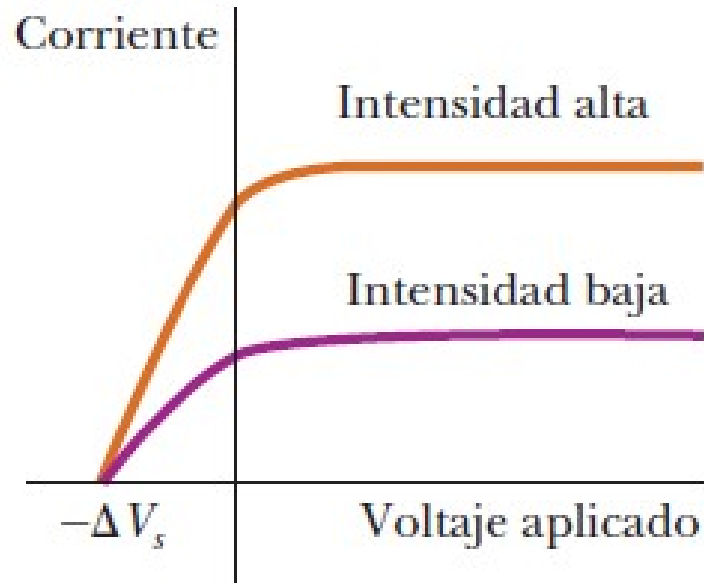
Sin embargo, cuando la placa E se ilumina con luz que tiene una λ más corta que cierta λ particular que depende del material utilizado para formar la placa E, el amperímetro detecta una corriente, lo que indica un flujo de cargas a través de la diferencia entre E y C.

Esta corriente surge de los fotocorrientes emitidos de la placa negativa E y recolectados en la placa positiva.



Los diversos experimentos se pueden resumir en las dos gráficas siguientes.

EFEECTO FOTOELÉCTRICO



Corriente fotoeléctrica en función de la diferencia de potencial aplicada a dos intensidades de luz.

La corriente aumenta al incrementar la intensidad, pero con valores altos de V llega a un nivel de saturación.

Con voltajes iguales o más negativos que V_s , en donde V_s es el potencial de frenado, la corriente es igual a cero.

Resultados experimentales:

Si V se hace suficientemente grande la corriente alcanza cierto valor de saturación.

Si el voltaje se invierte, la corriente no cae a cero, lo que muestra que los electrones son emitidos con una cierta energía cinética K .

Si se alcanza cierto valor V_s (**potencial de frenado**), corriente se anula. Por tanto es una medida de la **energía cinética máxima ($K_{MÁX}$)**

$$K_{MÁX} = eV_s \quad (1)$$

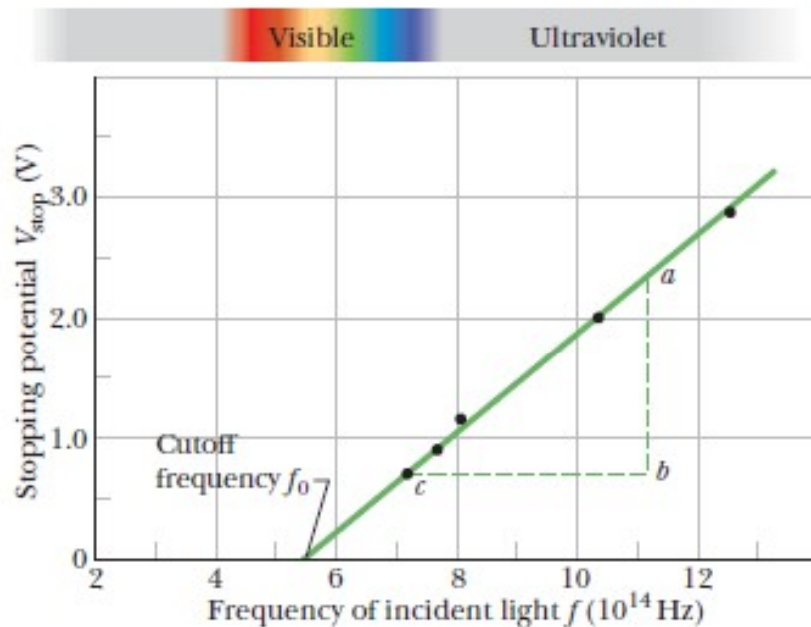
El valor de $K_{MÁX}$ es independiente de la intensidad luminosa I .

EFECTO FOTOELÉCTRICO

Potencial retardador- frecuencia de luz incidente

Electrons can escape only if the light frequency exceeds a certain value.

The escaping electron's kinetic energy is greater for a greater light frequency.



El potencial de frenado V_{STOP} como una función de la frecuencia f de la luz incidente sobre un blanco de sodio.

Existe una frecuencia f_U , llamada **frecuencia de corte o umbral** por debajo de la cual no ocurre efecto fotoeléctrico.

Por tanto también existe una **longitud de onda umbral** λ_U , por encima de la cual no hay efecto fotoeléctrico.

Hechos que no puede explicar la teoría electromagnética clásica:

- 1) K_{MAX} de los electrones arrancados la placa es independiente de la intensidad de iluminación I (V_S no depende de I).
- 2) Para frecuencias menores a f_U no ocurre el fenómeno fotoeléctrico cualquiera sea el valor de I .
- 3) Emisión casi instantánea ($< 10^{-9}$ s después de que se ilumina incluso con intensidades de luz muy bajas).
- 4) K_{MAX} de los fotoelectrones aumenta al incrementarse la frecuencia de la luz.

EFECTO FOTOELÉCTRICO

Explicación de Einstein (1905)

La luz viaja en el espacio en forma de “paquetes de onda” llamados **fotones** cuya energía está cuantizada y vale: $E = h.f$ (2)

Siendo h la **constante de Planck**: $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ y f la frecuencia.

Cuando el fotón incide sobre la placa, su energía se invierte:

- trabajo de extracción del electrón (ϕ **función trabajo** energía mínima necesaria para que un electrón escape de las fuerzas atractivas del metal característica del metal de la placa) y,
- proporcionarle energía cinética K .

Si el electrón no colisiona cuando escapa (no “hay pérdidas”) se cumple:

$$h.f = K_{MÁX} + \phi \quad (3)$$

Si se duplica la intensidad de la iluminación se duplica en número de fotones incidentes y por tanto también los electrones arrancados, lo que duplica la corriente de saturación.

El potencial de frenado ($V_S \approx K_{MÁX}$) es independiente del número de fotones, y por tanto de la intensidad de iluminación I .

$$h.f = eV_S + \phi \quad V_S = (h.f/e) - (\phi/e)$$

$$h.f = \frac{h.c}{\lambda} = K_{MÁX} + \phi = e.V_S + \phi$$

$$h.c = 1.240 \text{ eV.nm}$$

$$h.f_u = \phi$$

FOTONES Y ONDAS ELECTROMAGNÉTICAS

El efecto fotoeléctrico y otros fenómenos muestran que cuando la radiación electromagnética interactúa con la materia, se comporta como si estuviera compuesta de partículas:

con energía $E = hf$ y *cantidad de movimiento* $p = h/\lambda$.

La luz se describe en términos de fotones con cierta energía y cantidad de movimiento.

La luz y otras ondas electromagnéticas exhiben efectos de interferencia y de difracción, que son entendibles solo mediante una interpretación ondulatoria.

Hay que aceptar ambos modelos y admitir que no es posible describir la naturaleza verdadera de la luz en función de ninguna concepción clásica única.

El modelo de partícula y el modelo ondulatorio de la luz se complementan.

EJEMPLO: Ejercicio 6.2.1

Se ilumina una superficie de potasio con luz ultravioleta de longitud de onda 2500Å. La función de trabajo del potasio vale 2,21 eV.

- a) ¿Cuál es la máxima energía cinética de los electrones emitidos?
b) Suponiendo que la luz ultravioleta tiene una intensidad 2,00 W/m², calcule el número de electrones emitidos por unidad de área y por unidad de tiempo.

Datos: $\lambda = 2500\text{Å}$ $\phi = 2,21\text{ eV}$

$$h.f = K_{MÁX} + \phi \quad \text{Pero: } f = c/\lambda \quad \frac{h.c}{\lambda} = K_{MÁX} + \phi \Rightarrow K_{MÁX} = \frac{h.c}{\lambda} - \phi$$

Conversión muy útil:

$$h.c = 12410\text{ eV.Å} = 1,24 \times 10^3\text{ eV.nm}$$

$$K_{MÁX} = \frac{h.c}{\lambda} - \phi = \frac{12410}{2500} - 2,21 = 4,964 - 2,21 = 2,754\text{ eV}$$

Cada fotón tiene una energía de 4,964 eV.

$$K_{MÁX} = 2,75\text{ eV} = 4,43 \times 10^{-19}\text{ J}$$

$$1\text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19}\text{ J}$$

b) Supongo que cada fotón provoca la emisión de un electrón.

En cada segundo, y en cada m² incide una energía de 2,00 J, por tanto debo saber cuántos fotones con 4,964 eV de energía se liberarían...

$$2,00\text{ J} = 2,00\text{ J} \times \frac{1\text{ eV}}{1,602 \times 10^{-19}\text{ J}} = 1,248 \times 10^{19}\text{ eV}$$

$$N = \frac{E}{hf} = \frac{1,248 \times 10^{19}}{4,964} = 2,515 \times 10^{18}$$

Se emite $2,51 \times 10^{18}$ fotoelectrones por unidad de área y tiempo.

EJEMPLO: Ejercicio 6.2.2

El emisor de un tubo fotoeléctrico tiene una longitud de onda umbral de 6000 Å. Calcular la longitud de onda de la luz incidente si el potencial de frenado para esta luz es de 2,50 V.

Datos: $\lambda_U = 6000 \text{ \AA}$ $V_s = 2,50 \text{ eV}$

La función de trabajo ϕ cumple que: $\phi = hf_U = \frac{hc}{\lambda_U}$

$$\phi = hf_U = \frac{hc}{\lambda_U} = \frac{12410}{6000} = 2,068 \text{ eV}$$

$$K_{MÁX} = eV_s = 2,50 \text{ eV}$$

$$\frac{h \cdot c}{\lambda} = K_{MÁX} + \phi \quad \lambda = \frac{h \cdot c}{K_{MÁX} + \phi} = \frac{12410}{2,50 + 2,068} = 2716 \text{ \AA}$$

$$\lambda = 272 \text{ nm}$$

PROPIEDADES ONDULATORIAS DE LA MATERIA

A nivel macroscópico todas las observaciones pueden ser interpretadas considerando una explicación ondulatoria o una explicación a través de partículas, pero a nivel microscópico esta distinción no es tan clara.

Todavía más desconcertante que el comportamiento corpuscular de la radiación es el hecho que bajo ciertas condiciones las partículas... **¡exhiben características ondulatorias!**

En su disertación doctoral en 1923, Louis de Broglie postuló que **ya que los fotones tienen a la vez características ondulatorias y de partículas, es posible que todas las formas de la materia tengan ambas propiedades.**

Según De Broglie, los electrones, justo igual que la luz, tienen una naturaleza dual partícula-onda, lo que era una idea en extremo revolucionaria que en esas fechas no tenía ninguna confirmación experimental.

La cantidad de movimiento de un fotón puede ser expresada de la forma: $p = \frac{h}{\lambda}$
por tanto se cumple que $\lambda = h/p$.

*De Broglie sugirió que las partículas que tengan una cantidad de movimiento p tienen una longitud de onda característica (**longitud de onda de De Broglie**) dada por la misma expresión: $\lambda = h/p$.*

$p = mv$ es la magnitud de la cantidad de movimiento de una partícula de masa m y de rapidez v

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$



PROPIEDADES ONDULATORIAS DE LA MATERIA

Longitud de onda de De Broglie: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$

Además, en analogía con los fotones, De Broglie postuló que las partículas obedecen la relación de Einstein $E = hf$, donde E es la energía total de la partícula. En tal caso, la frecuencia de una partícula es

$$f = \frac{E}{h}$$

La naturaleza dual de la materia resulta evidente en estas dos últimas ecuaciones, ya que cada una contiene a la vez conceptos de partículas (p y E) y cantidades ondulatorias (λ y f).

Si se consideran efectos relativistas:

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

El experimento Davisson-Germer en 1927 confirmó la hipótesis de De Broglie al demostrar que los electrones que se dispersan de cristales forman un patrón de difracción.

G.P. Thomson: difracción de electrones en la transmisión de los mismos a través de hojas metálicas delgadas

Posteriormente: se observó difracción de neutrones, protones y otras partículas.

PROPIEDADES ONDULATORIAS DE LA MATERIA

Ejemplo: a) Comparar la λ de De Broglie para un electrón ($m_e = 9,11 \times 10^{-31}$ kg) que se mueve con una velocidad igual a $1,00 \times 10^7$ m/s, con la de una pelota de béisbol de 0,145 kg de masa que se lanza a 45,0 m/s.

$$\lambda_e = \frac{h}{m_e v} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{(9,11 \times 10^{-31})(1,00 \times 10^7)} = 7,28 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$\lambda_b = \frac{h}{m_b v} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{(0,145)(45,0)} = 1,02 \times 10^{-34} \text{ m}$$

La longitud de onda del electrón corresponde a la de los rayos X en el espectro electromagnético. La pelota de béisbol, en contraste, tiene una longitud de onda mucho menor que cualquier abertura a través de la cual posiblemente pudiera pasar la pelota, de modo que no se podrían observar efectos de difracción.

DUALIDAD ONDA-PARTÍCULA

La luz, normalmente considerada como una onda, presenta propiedades corpusculares cuando interacciona con la materia, mientras que los electrones, considerados partículas, presentan propiedades ondulatorias. Todos los fenómenos (electrones, átomos, luz, sonido, etc.) tienen características tanto de ondas como partículas.

Conceptos partículas y ondas clásicas no describen adecuadamente comportamiento de ningún fenómeno.

Se debe adoptar la dualidad onda-partícula.

Microscopio electrónico

Es un dispositivo práctico basado en las propiedades ondulatorias de los electrones.

La figura muestra un **microscopio electrónico de transmisión**, usado para ver delgadas muestras planas.

Tiene un poder de resolución mucho mayor que el óptico porque puede acelerar electrones a energías cinéticas muy altas, lo que les da λ muy cortas.

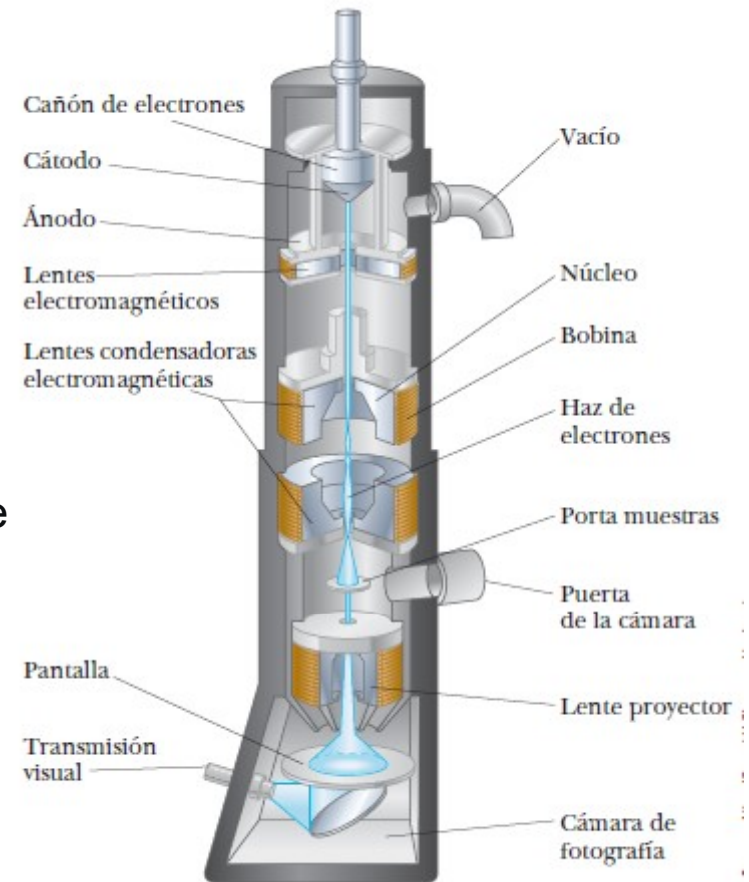
Ningún microscopio puede resolver detalles que sean significativamente menores que la λ de la radiación que se usa para iluminar el objeto.

Las λ de los electrones en un microscopio electrónico son menores que las λ visibles por un factor de más o menos 10^{-5} .

El haz de electrones en un microscopio electrónico se controla mediante desviación electrostática o magnética, que actúa sobre los electrones para enfocar el haz a una imagen (lentes electromagnéticas).

Sin embargo, debido a limitaciones en las lentes electromagnéticas usadas, la mejora en resolución sobre los microscopios ópticos sólo es de un factor aproximado de 2 o 3 órdenes de magnitud.

En lugar de examinar la imagen a través de un ocular como en el óptico, el observador mira una imagen formada sobre una pantalla fluorescente.



EJEMPLO: Ejercicio 6.2.7

Calcular el potencial bajo el cual debe acelerarse un electrón de forma que éste adquiera una longitud de onda de De Broglie de $1,0 \text{ \AA}$.

Datos: $\lambda_B = 1,0 \text{ \AA}$ $m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$

A partir de la ecuación de De Broglie $p = \frac{h}{\lambda_B} = \frac{6,626 \times 10^{-34}}{1,0 \times 10^{-10}} = 6,626 \times 10^{-24} \text{ kg.m/s}$

Considero que la energía potencial eléctrica es igual a la energía cinética

$$e \cdot \Delta V = K = \frac{p^2}{2m}$$

$$\Delta V = \frac{p^2}{2me} = \frac{(6,626 \times 10^{-24})^2}{2(9,11 \times 10^{-31})(1,602 \times 10^{-19})} = 150 \text{ V}$$

$$\Delta V = 0,15 \text{ KV}$$

